

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**Explorando nuevas relaciones de similaridad entre elementos metálicos de
la Tabla Periódica**

**Trabajo de investigación para obtener el grado académico de Bachiller en
Ciencias con mención en Química presentado por:**

Marcos Wilfredo Alarcón Chalco

Asesor:

Maynard Jorge Kong Moreno

Lima, 2020

Resumen

Este trabajo busca profundizar en los sistemas periódicos de los elementos químicos y para ello será necesario explorar diferentes conceptos. Podemos destacar el orden y la similaridad de los elementos que son los dos grandes pilares que permiten definir a cada sistema periódico. Por otro lado están las sustancias básicas y las sustancias simples; poder diferenciar entre ambas permite una mejor caracterización de los elementos químicos para explorar su similaridad.

Para formalizar conceptos se recurrirá a diferentes campos matemáticos como lo son la teoría de grafos, la topología, los conjuntos parcialmente ordenados y los conjuntos difusos. También se abordarán herramientas computacionales para la clasificación de objetos como las redes neuronales de Kohonen, el agrupamiento difuso y el análisis jerárquico de clusters.

También se mostrarán los diferentes avances obtenidos por los estudios en este campo; todos estos utilizan las herramientas computacionales anteriormente mencionadas. Dos grandes aportes que se destacarán son la quimiotopología propuesta en [Restrepo et al., 2004] y la generalización del concepto de orden en [Leal y Restrepo, 2019].

Por último se explorarán las relaciones de similaridad difusas que existen para clasificar a los elementos metálicos de transición, esto quiere decir que para un autor el Fe puede ser más similar al Co y Ni , pero para otro es más similar a Ru y Os .

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi familia; especialmente a mis padres, por el apoyo incondicional en cada momento de mi vida, y a mis hermanos, por ser tan influyentes en la formación de mi personalidad. También quiero agradecerles por todas las experiencias que me han aportado y por todos los consejos brindados en los momentos más críticos que me han tocado vivir.

También deseo agradecer a todos los profesores de mi etapa universitaria, en especial a mi asesor por darme la oportunidad de investigar en el campo de la química teórica. Y por último, a mis amigos. Sin lugar a dudas todos han dejado una marca en mi vida que atesoraré por el resto de mi vida.



Dedicatoria

Dedico este trabajo a todas las personas que ejerzan la labor de divulgar la ciencia, el arte y el pensamiento crítico de forma profesional.

Explorando nuevas relaciones de similaridad entre elementos metálicos de la Tabla Periódica

Marcos Alarcón Chalco

2 de noviembre de 2025

Índice

1. Introducción	1
1.1. Los Elementos Químicos en el Centro del Problema Fundamental	1
1.2. Tabla Periódica y su Importancia	1
1.3. Sustancias Simples y Sustancias Básicas	2
1.4. Sistema periódico, ley periódica y Tabla Periódica	4
1.5. Necesidad de profundizar en el Sistema Periódico sobre los elementos metálicos	5
2. Herramientas Matemáticas y Computacionales	5
2.1. Relaciones	6
2.2. Teoría de Grafos	6
2.2.1. Hipergrafos	9
2.3. Órdenes Parciales	9
2.4. Topología	10
2.5. Análisis Jerárquico de Clusters	12
2.6. Relaciones Difusas	15
2.7. Redes Neuronales	17
2.7.1. Redes Neuronales de Kohonen	19
3. Revisión de los Estudios de Similaridad	20
3.1. Estudios basados en Relaciones Difusas	20
3.1.1. Zhou 2000	20
3.1.2. Karakasidis & Georgou 2004	21
3.2. Estudios basados en Redes Neuronales de Kohonen	22
3.2.1. Chen 2010	22
3.3. Estudios basados en el Análisis Jerárquico de Clusters	23
3.3.1. Sneath 2000	23
3.3.2. Restrepo 2004	24
3.3.3. Restrepo 2006	26
3.3.4. Leal 2012	28
3.3.5. Leal 2019	30
3.4. Reflexión sobre el avance de los estudios de similaridad	33
4. Relaciones de Similaridad entre los Elementos Metálicos	34
4.1. Clasificaciones sistemáticas de los elementos metálicos	34
5. Conclusiones	37
Referencias	38

Índice de figuras

1.	Diagrama generalizado de compuestos y reacciones. Adaptado de [Schummer, 1998]	1
2.	Sustancias simples, básicas y su relación con los compuestos y propiedades. Adaptado de [Restrepo, 2018]	3
3.	Cartogramas de difusión en la Tabla Periódica para evaluar el punto de fusión y densidad [Winter, 2011].	4
4.	Representación de un grafo. Adaptado de [Diestel et al., 2010]	7
5.	Árbol y árbol binario. Adaptado de [Diestel et al., 2010]	8
6.	Ejemplo de subárbol	8
7.	Dígrafo y aristas con peso. Adaptado de [Diestel et al., 2010]	9
8.	Representación de un hipergrafo. Adaptado de [Bretto, 2013].	9
9.	Representación de un orden parcial.	10
10.	Conjuntos evaluados en espacios topológicos	12
11.	Construcción de un dendrograma [Flores Turpo, 2019]	14
12.	Árbol de partición	17
13.	Representación del funcionamiento de una neurona artificial. Adaptado de [Dougherty, 1995]	18
14.	Representación general de una red neuronal [Dougherty, 1995]	18
15.	Aplicación de una red neuronal de Kohonen [Rojas, 2013]	19
16.	Clasificación de los elementos químicos de [Zhou X. Z., 2000].	21
17.	Clasificación de los elementos químicos en [Chen, 2010]	22
18.	Clasificación de elementos químicos de [Sneath, 2000]	23
19.	Clasificación de los elementos de [Restrepo et al., 2004]	25
20.	Clasificación de los elementos químicos de [Restrepo et al., 2006]	27
21.	Clasificación de los elementos químicos de [Leal et al., 2012]	29
22.	Ordenes totales y parciales sobre los elementos químicos [Leal y Restrepo, 2019]	30
23.	Ejemplo de sistema periódico [Leal y Restrepo, 2019]	31
24.	Estructura formal del sistema periódico [Leal y Restrepo, 2019]	32
25.	Clasificación de los elementos químicos en [Habashi, 2010]	35
26.	Clasificación de los metales de transición en [Schweitzer y Pesterfield, 2010]	36
27.	Clasificación de los metales de transición propuesto en [Rayner-Canham, 2018].	36

Índice de tablas

1.	Métricas comunes [Restrepo et al., 2004]	13
2.	Metodologías de agrupamiento [Restrepo et al., 2004]	13
3.	Ejemplo AJC parte I. Adaptado de [Flores Turpo, 2019]	13
4.	Ejemplo AJC parte II. Adaptado de [Flores Turpo, 2019]	14
5.	Ejemplo AJC parte III. Adaptado de [Flores Turpo, 2019]	14
6.	Ejemplo AJC parte IV. Adaptado de [Flores Turpo, 2019]	14

1. Introducción

1.1. Los Elementos Químicos en el Centro del Problema Fundamental

Imaginemos todas las especies químicas que pueden existir y las reacciones químicas que las relacionan. Por ejemplo, si las únicas especies químicas fuesen A, B, C, D, E, F, G y H; y además las únicas reacciones químicas existentes fuesen $R_1(A + B \longrightarrow C + D)$, $R_2(E + F \longrightarrow A)$ y $R_3(H + C \longrightarrow E + G)$, entonces una posible representación de esta información sería un diagrama como el mostrado en la Figura 1.

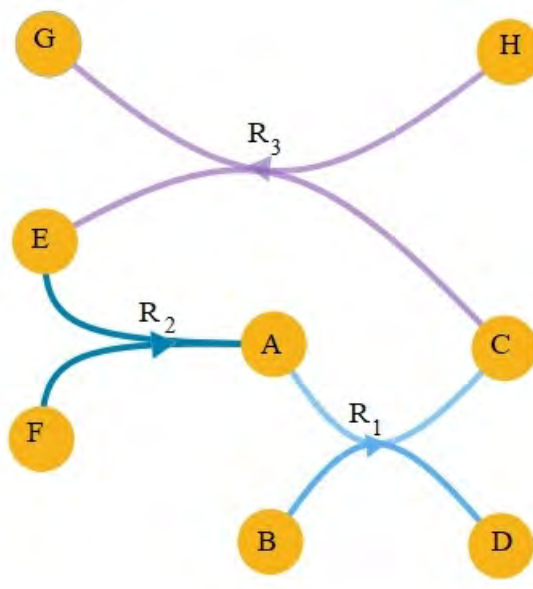


Figura 1: Representación simple de sustancias químicas hipotéticas y las reacciones químicas que las interrelacionan. Adaptado de [Schummer, 1998].

La estructura real sería altamente compleja y la información expuesta puede complicarse aún más si asociamos cada reacción química con parámetros físicos como la presión o la temperatura. En *The chemical core of chemistry, a conceptual approach* de Joachim Schummer [Schummer, 1998] se presenta a esta estructura como el núcleo de la química, y su comprensión y descripción serían problemas fundamentales. Dentro de esta, los elementos químicos ocupan un rol destacado, pues son la base que la origina en su totalidad; es decir, dentro del núcleo mismo de la química, los elementos químicos tienen un rol central.

Por supuesto, lo anteriormente explicado cae en el campo de la filosofía. Algunos creeremos en lo planteado por Joachim Schummer y otros no, pero nadie puede dudar que los elementos tienen una gran relevancia en la química.

1.2. Tabla Periódica y su Importancia

Los elementos químicos han sido ordenados en un arreglo bidimensional llamado Tabla Periódica y realmente, para cualquiera que trabaje en un área mínimamente relacionada con la química, no necesita mayor presentación. Desde los primeros intentos por clasificar elementos, los aportes de estos a la ciencia han sido sustanciales. Podemos destacar el trabajo de Dmitri Mendeleev que condujo a la predicción de varias propiedades químicas, antes que siquiera se conociese al electrón (y con ello, previo al entendimiento de los enlaces químicos) [Castleman Jr, 2011].

Eric Scerri en su libro *The Periodic Table, its History and Significance* hace importantes reflexiones sobre la importancia de la Tabla Periódica.

It is sometimes said that chemistry has no deep ideas, unlike physics, which can boast quantum mechanics and relativity, and biology, which has produced the theory of evolution. This view is mistaken, however, since there are in fact two big ideas in chemistry. They are chemical periodicity and chemical bonding, and they are deeply interconnected.

[Scerri, 2019, p.XV]

Scerri continúa asegurando que la Tabla Periódica es una fascinante herramienta que sintetiza gran cantidad de reacciones químicas gracias a los agrupamientos que denominamos familias o grupos. Al mismo tiempo insiste en que la reducción de la Tabla Periódica a mecánica cuántica es muy enfatizada e incompleta, aunque los aportes de la mecánica cuántica en el entendimiento de la Tabla Periódica son innegables [Scerri, 2019, cap. 1].

Pero además de cuestiones físicas, químicas y filosóficas, la Tabla Periódica ha tenido mayor impacto. En el mundo artístico, la Tabla Periódica ha influido en varias composiciones musicales, así como también en obras literarias. Un ejemplo concreto es el libro *The periodic Table* de Primo Levi, nombrado como el mejor libro de ciencia de todos los tiempos por la Real Institución de Gran Bretaña [Shaik et al., 2019].

1.3. Sustancias Simples y Sustancias Básicas

El concepto de elemento ha cambiado muchísimo a través de la historia, pues es un término usado desde la antigua Grecia. Con mucho menos misticismo, en 1660 Boyle definió a los elementos como las sustancias que no pueden ser descompuestas mediante algún proceso químico. Con esta nueva definición, se logró identificar varios nuevos elementos [Wang y Schwarz, 2009].

Mendeleev tenía una concepción de mayor interés. Él distinguía los elementos aislados en los laboratorios mediante procesos químicos, así como una parte invisible que estaría presente, no solo en los elementos aislados, sino también en todos los compuestos que se forman a partir de este elemento. Por ejemplo, el óxido de mercurio no contiene ni mercurio metálico ni oxígeno gaseoso, pero sí mercurio y oxígeno de una forma más trascendental [Scerri, 2009]. Esta dualidad en la concepción de los elementos conduce a que se deba tener diferentes términos para no caer en ambigüedades; estos términos son los de sustancia simple y sustancia básica. Una sustancia básica es la parte abstracta de cada elemento presente en todos sus compuestos, y una sustancia simple es la realización física de una sustancia básica [Paneth, 1962].

Es importante resaltar que muchas propiedades asociadas a los elementos como la densidad, conductividad eléctrica o dureza, son referentes a las sustancias simples. Por ejemplo, el diamante tiene una dureza diferente a la del grafito, pero ambos son carbono; por lo tanto, la dureza no es una característica de las sustancias básicas, pero tanto el grafito como el diamante pueden arder y formar CO_2 . Es por ello que los compuestos son la herramienta con la que se pueden explorar las sustancias básicas. En la Figura 2 se esquematiza lo descrito anteriormente.

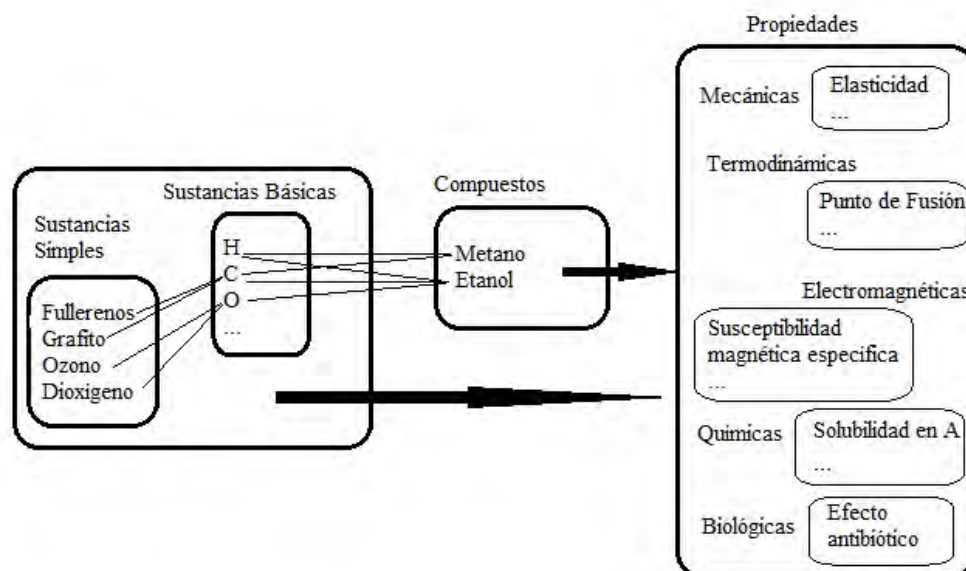


Figura 2: Representación de sustancias básicas y simples. Como se puede observar, ambas pertenecen a diferentes planos; las sustancias simples poseen propiedades que podemos explorar. Las sustancias básicas son exploradas por medio de los compuestos. Adaptado de [Restrepo, 2018].

Una pregunta muy natural, luego de conocer el concepto de sustancia básica, es si las sustancias básicas pueden ser entendidas como átomos. Los átomos no representan de forma generalizada a las sustancias básicas; por ejemplo, los diferentes isótopos de los elementos pueden formar los mismos compuestos químicos, pero tienen diferentes masas. Por lo tanto, los átomos también son entendidos como sustancias simples y no básicas. Es imposible negar que la teoría atómica ha aportado conocimiento de las sustancias básicas, pues con esta podemos asignar un orden en los elementos, lo que en la teoría atómica conocemos como número atómico [Scerri, 2019, cap. 13].

Hacer esta distinción es muy importante al identificar elementos similares. Mendeleev construyó su tabla periódica basándose en los compuestos que formaban los elementos químicos; dado que los compuestos sirven para explorar a las sustancias básicas, como ya se mencionó, podemos decir que Mendeleev intentó ordenar y clasificar a las sustancias básicas.

Es común encontrar en la literatura que el punto de fusión o la densidad de los elementos químicos se comportan siguiendo cierta periodicidad. Por ejemplo, en la Figura 3 se ilustra el comportamiento del punto de fusión y la densidad de los elementos químicos; para ello se utilizaron cartogramas de difusión, donde los elementos químicos con mayores puntos de fusión o mayor densidad aparecerán ocupando espacios más grandes [Winter, 2011]. Como se puede observar, el punto de fusión de un elemento es similar a los puntos de fusión de sus elementos vecinos, por lo que uno podría imaginar que el punto de fusión es una propiedad útil para identificar elementos similares y lo mismo podemos decir de la densidad. Ese razonamiento es correcto, pero debemos tener en cuenta que estas propiedades corresponden a sustancias simples, pues el punto de fusión del grafito no es el mismo que el del diamante. Ello trae como consecuencia que solo se considere a una forma alotrópica del carbono y entonces no se está representando al elemento de forma generalizada [Restrepo, 2018]. Con este ejemplo, queda claro que al momento de clasificar a los elementos, sus características como sustancias básicas son las más generales.

den corresponder a propiedades físicas, que asociamos a las sustancias simples; por ejemplo, la Figura 3 esquematiza una ley periódica para el punto de fusión y la densidad.

Es importante resaltar que se habla de «*un sistema periódico*» y no de «*el sistema periódico*», pues según como se defina el orden o la similaridad se obtendrán diferentes sistemas periódicos. De forma similar, dependiendo de cómo se representa un sistema periódico se pueden obtener diferentes tablas periódicas; por ello lo correcto es hablar de «*una tabla periódica*» y no de «*la tabla periódica*» [Scerri, 2019]. Sin embargo, dado que solo hay una tabla periódica conocida por una amplia mayoría de personas, es común escuchar hablar de «*la tabla periódica*».

1.5. Necesidad de profundizar en el Sistema Periódico sobre los elementos metálicos

En libros como *Advanced Inorganic Chemistry* de Cotton, se estudian los elementos metálicos siguiendo una clasificación en base a los grupos (columnas) de la Tabla Periódica para los elementos de los bloques s y p. Sin embargo, para los elementos del bloque d la clasificación no es en base a las columnas. El escandio y el itrio son agrupados junto con todos los lantánidos; el zinc es el único metal de la primera serie de transición que se agrupa junto con los elementos de su misma columna. El resto de metales del bloque d son agrupados según su fila, de tal manera que el titanio, vanadio, cromo, manganeso, hierro, cobalto, níquel y cobre forman un mismo grupo [Cotton et al., 1988].

Por otro lado, en *Chemistry of the Elements* de Greenwood los elementos del bloque d son clasificados por las columnas a las que pertenecen en la tabla periódica. Esta es también la forma en como se agrupan los elementos de los bloques s y p [Greenwood y Earnshaw, 2012].

Estos libros son muy consultados por estudiantes de química inorgánica descriptiva. El motivo de sus clasificaciones responden a observar diferentes patrones en la similaridad de estos elementos [Rayner-Canham, 2018]. En el bloque de los metales de transición, la similaridad horizontal entre los elementos es más clara; por ejemplo, la terna hierro, cobalto y níquel tienen una clara relación horizontal muy marcada [Lee, 2008]. Por otro lado, los lantánidos y actínidos también tienen similitudes horizontales marcadas, pero con estos no hay ningún interés en clasificarlos de una forma diferente. Esta discrepancia solo es propia en los metales del bloque d.

En [Rayner-Canham, 2018], se expone esta problemática y por ello se resalta la necesidad de explorar la similaridad en los elementos metálicos. También se resalta que un agrupamiento óptimo debería ser capaz de mostrar la mayor cantidad de similitudes entre los elementos metálicos, sin dejar de mostrar las disimilitudes entre los elementos.

2. Herramientas Matemáticas y Computacionales

En esta sección se explicarán diferentes herramientas que serán útiles a lo largo de todos los estudios de similaridad expuestos. Dado que puede ser confuso para quienes no están acostumbrados a tratar cuestiones matemáticas, se hará una guía sencilla de la relevancia de cada una de las herramientas.

Para abordar la similaridad entre los elementos químicos, se usan tres herramientas principales: el análisis jerárquico de clusters, las relaciones difusas y las redes neuronales de Kohonen. Estas buscan generar una clasificación sobre los elementos químicos en base a un conjunto de propiedades. En el caso del análisis jerárquico de clusters se puede profundizar en sus resultados por medio de conceptos topológicos.

La teoría de grafos permite describir a los dendrogramas y a los árboles de partición, estructuras útiles para describir la similaridad entre los elementos. También se usará teoría de grafos para hablar de conjuntos ordenados parcialmente, que son una herramienta muy útil para describir un orden establecido de los elementos químicos en determinado sistema periódico.

2.1. Relaciones

Sea A un conjunto con los elementos a , b y c ($A = \{a, b, c\}$). A^2 es conjunto de pares ordenados (u, v) donde u y v pertenecen a A ($A^2 = \{(a, a), (a, b), (a, c), (b, a), (b, b), (b, c), (c, a), (c, b), (c, c)\}$). Una relación R definida en el conjunto A es básicamente un subconjunto de A^2 . Un ejemplo de una relación en el conjunto A ya definido sería $R = \{(a, b), (b, b), (c, a), (c, b)\}$. De forma simplificada, para decir que un par ordenado (u, v) pertenece a la relación R se usa la notación uRv , de lo contrario $u \not R v$ [Adhikari y Adhikari, 2014, cap. 1].

Las relaciones son muy útiles, porque su abstracción permite que estas representen a muchas cosas a la vez. Por ejemplo, sea \mathbb{R} el conjunto de números reales, podemos definir una relación C sobre \mathbb{R} que represente a los puntos en el plano que pertenecen a una circunferencia con radio igual a 5 y centro en el origen. Esta relación sería $C = \{(a, b) \in \mathbb{R}^2 : a^2 + b^2 = 5^2\}$. Al mismo tiempo, también se podrían representar las relaciones de amistad de alguna red social mediante relaciones: sea F la relación de amistad en una red social, entonces si Alexis es amigo de Jhilmer es cierto que $(Alexis, Jhilmer) \in F$.

Consideremos la relación \preceq definida sobre el conjunto A cuyos elementos son a , b y c . La relación será de orden si y solo si es reflexiva, antisimétrica y transitiva. Una relación es reflexiva si todo elemento está relacionado consigo mismo, por ejemplo $a \preceq a$. Ser antisimétrica implica que si $a \preceq b$, entonces $a \not\preceq b$. Y ser transitiva implica que $a \preceq b$ y $b \preceq c$, entonces $a \preceq c$ [Leal y Restrepo, 2019].

Consideremos la relación \sim definida sobre el conjunto A y sean a y b dos elementos de A . La relación \sim es de similaridad si y solo si es reflexiva y simétrica. Que sea simétrica significa que si $a \sim b$ entonces $b \sim a$. Las relaciones de similaridad son utilizadas para la clasificación de elementos de conjuntos [Leal y Restrepo, 2019]. Incluso se puede asegurar que toda clasificación define una relación de similaridad. Por lo tanto, el análisis jerárquico de clusters, las relaciones difusas y las redes neuronales de Kohonen son técnicas que nos permiten definir relaciones de similaridad.

2.2. Teoría de Grafos

Un grafo G está compuesto por dos conjuntos, uno de vértices V y otro de aristas E , es decir, $G = (V, E)$. Las aristas son un subconjunto de pares no ordenados de V^2 . Los grafos pueden representarse de una forma muy sencilla; consideremos un conjunto $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ y $E = \{\{1, 2\}, \{1, 5\}, \{2, 5\}, \{3, 4\}, \{5, 7\}\}$, una forma de representar al grafo $G = (V, E)$ se muestra en la Figura 4 [Diestel et al., 2010, cap. 1].

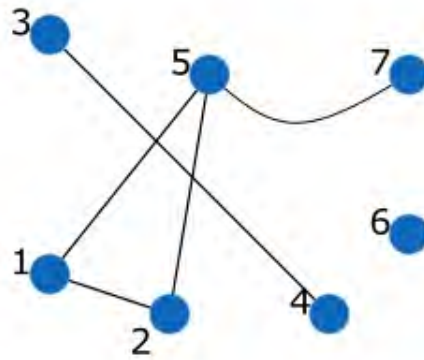


Figura 4: Representación de un grafo con $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ y $E = \{\{1, 2\}, \{1, 5\}, \{2, 5\}, \{3, 4\}, \{5, 7\}\}$. Adaptado de [Diestel et al., 2010].

En un grafo $G = (V, E)$ se dice que u es adyacente a v si $\{u, v\} \in E$. El grado de un vértice es igual al número de aristas que contienen al vértice, el grado de un vértice u se representa por $\deg(u)$. Por ejemplo en la Figura 4, 1 es adyacente a 2 y $\deg(5) = 3$. Al conjunto de vértices adyacentes a u se le denomina la adyacencia de u , la cual se representa como $G(u)$. En la Figura 4 la adyacencia del vértice 5 es $G(5) = \{1, 2, 7\}$.

Otro concepto muy importante es el camino; un camino es una secuencia de vértices $u_1, u_2, u_3, u_4, \dots, u_n$ en los que cada par de vértices consecutivos, u_i y u_{i+1} , son adyacentes. Además, si u_n es igual a u_1 este camino es considerado un ciclo, si un grafo no contiene ciclos se dice que es acíclico. Si existe un camino que lleva de un vértice u a todos los otros vértices pertenecientes a V , se dice que es un grafo conexo. El grafo mostrado en la Figura 4 posee un ciclo (1, 2, 5 y 1) y no es conexo, pues no existe ningún camino del nodo 6 a 3 o 4 [Diestel et al., 2010, cap. 1].

Un árbol es un tipo de grafo muy importante, el cual es conexo y acíclico. Podemos imaginárnoslo como un grafo en el que existe una mínima cantidad de aristas para mantener conectados todos sus vértices. En la Figura 5(a) podemos visualizar un árbol. Un árbol binario es un árbol con 3 tipos de vértices; el primero es llamado raíz, que permite inducir una orientación en el grafo como se muestra en la Figura 5(b); luego están las hojas, que son aquellos vértices en los que no existe un vértice adyacente a estos que esté más alejado del nodo raíz que estos mismos, todos los otros vértices son intermedios [Diestel et al., 2010, cap. 1].

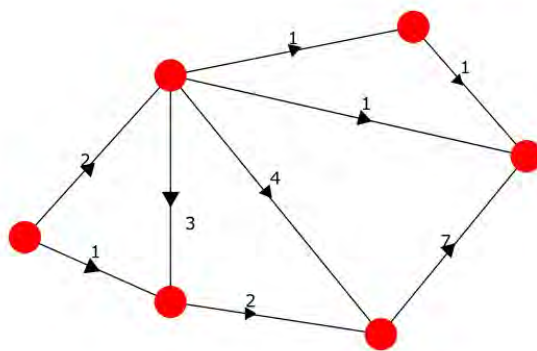


Figura 7: Se muestra un dígrafo cuyas aristas poseen pesos. Adaptado de [Diestel et al., 2010].

2.2.1. Hipergrafos

Como ya se explicó, en un grafo las aristas corresponden a un subconjunto de los diferentes pares de vértices. En un hipergrafo, las aristas corresponden a cualquier subconjunto de vértices y no únicamente a los de tamaño 2. Formalmente un hipergrafo H está definido por un conjunto de vértices V y un conjunto de hiperaristas E , es decir, $H = (V, E)$, donde E es un subconjunto de elementos no vacíos del conjunto potencia de V , $\mathcal{P}(V)$ [Bretto, 2013, cap. 1]. Para representar un hipergrafo, se suele dibujar cada elemento de V y cada determinados subconjuntos son encerrados si es que forman parte de una hiperarista. En el Figura 8 se representa al conjunto $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$ con las hiperaristas $\{1, 2, 3, 4\}$, $\{5, 6\}$, $\{1, 5, 8\}$ y $\{4, 6, 7, 8\}$.

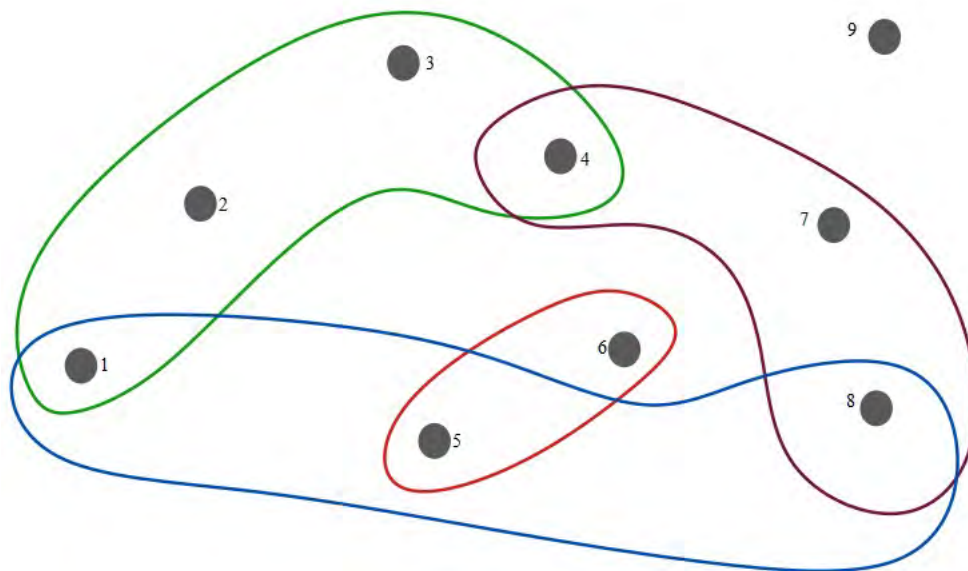


Figura 8: Representación de un hipergrafo. Adaptado de [Bretto, 2013].

2.3. Órdenes Parciales

Cuando se define una relación de orden \preceq sobre el conjunto X , esta puede corresponder a un orden total o parcial. Decimos \preceq es un orden total si para todo par de elementos a y b de X es cierto que $a \preceq b$ o $b \preceq a$. Un ejemplo de esto son los números enteros bajo la relación menor o igual (\leq), ya que dado cualquier par de elementos, uno de ellos siempre es menor o igual que el otro [Rao, 2002, cap. 5].

Sin embargo, no siempre es posible la comparación de cualquier par de elementos; esto sucede, por ejemplo, cuando se desea comparar pares ordenados. Un par ordenado (a, b) es menor o igual (\leq) que (c, d) si y solo si $a \leq c$ y $b \leq d$; por lo tanto $(1, 1) \leq (2, 2)$; sin embargo no es cierto que $(1, 2) \leq (2, 1)$ ni que $(2, 1) \leq (1, 2)$. Cuando una relación de orden no es capaz de comparar todo para de elementos, decimos que estamos frente a un orden parcial. Un orden parcial sobre determinado conjunto puede representarse mediante los diagramas de Hasse. En estos diagramas se representa con una flecha de un elemento a a un elemento b si $a \preceq b$ y además no existe ningún elemento c tal que $a \preceq c$ y $c \preceq b$. Esta última condición tiene como fin construir un diagrama con un mínimo de flechas. Por ejemplo, en la Figura 9 se representa a un conjunto $X = \{(1, 1), (2, 2), (3, 4), (4, 3), (5, 5)\}$ y la relación de orden \leq ya definida mediante un diagrama de Hasse; notar que no se incluye una flecha de $(1, 1)$ a $(3, 4)$, no es necesaria ya que esta se entiende con las flechas de $(1, 1)$ a $(2, 2)$ y de $(2, 2)$ a $(3, 4)$ [Rao, 2002, cap. 5].

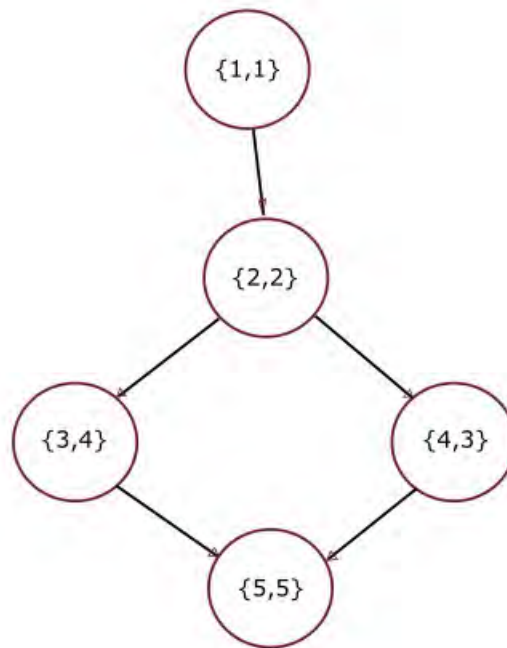


Figura 9: Representación de un orden parcial.

2.4. Topología

Sea un conjunto X finito sobre el cual definimos el conjunto τ cuyos elementos O_j son subconjuntos de X tal que

- $X \in \tau$
- $\emptyset \in \tau$
- $\bigcup_{i \in I} O_j \in \tau$, donde I es un conjunto de índices
- $\bigcap_{i \in I} O_j \in \tau$, donde I es un conjunto de índices

Entonces se dice que τ es una topología. Estrictamente sería una topología finita. Ya que aquí no se considerarán topologías infinitas, convenientemente se ha relajado la definición. Al par (X, τ) se le denomina espacio topológico [Yan, 2016, cap. 4].

Al igual que en muchas estructuras matemáticas, es posible definir una base. Se dice que un subconjunto de τ es una base B si todos los elementos $O_j \in \tau$ se pueden formar por la unión de elementos de B .

Para las siguientes definiciones se trabajará sobre un conjunto X sobre el cual se ha definido una topología τ , cuyos elementos se representan de forma general como O_j , con una base B . Además se tendrá en cuenta al conjunto Ω que es un subconjunto de X y no necesariamente pertenece a τ . Estas definiciones son útiles para profundizar en la similaridad de los elementos químicos, como se verá más adelante; por lo que cada definición será acompañada con una interpretación en el contexto de la similaridad. Para ello es necesario imaginar que los elementos O_j de τ están conformados por elementos con cierto grado de similaridad y que los elementos que constituyen B representan a los grupos con mayor similaridad.

Sea $x \in X$, se dice que x es un punto cerrado de Ω si para todo elemento $O_j \in \tau$ tal que $x \in O_j$ se cumple $O_j \cap \Omega \neq \emptyset$. Al conjunto de todos los puntos cerrados de Ω se le denomina conjunto cerrado de Ω y se denota como $\bar{\Omega}$. En el contexto de la similaridad, $\bar{\Omega}$ puede entenderse como el conjunto de elementos que son similares a algún elemento de Ω , por lo que todos los elementos de Ω pertenecen a $\bar{\Omega}$.

Se dice que $x \in X$ es un punto de acumulación de Ω si para todo elemento $O_j \in \tau$ tal que $x \in O_j$ se cumple $(O_j - \{x\}) \cap \Omega \neq \emptyset$. Al conjunto de todos los puntos de acumulación de Ω se le denomina conjunto derivado de Ω y se denota como Ω' . En el contexto de la similaridad, Ω' puede entenderse como el conjunto de elementos que son similares a algún elemento de Ω diferente a sí mismo.

Se dice que $x \in X$ es un punto bordeal de Ω si para todo elemento $O_j \in \tau$ tal que $x \in O_j$ se cumple $O_j \cap \Omega \neq \emptyset$ y $O_j \cap (X - \Omega) \neq \emptyset$. Al conjunto de todos los puntos bordeales de Ω se le denomina conjunto bordeal de Ω y se denota como $b(\Omega)$. En el contexto de la similaridad, $b(\Omega)$ puede entenderse como el conjunto de elementos que son similares a Ω , pero al mismo tiempo son similares al conjunto de elementos que no pertenecen a Ω , estos son $X - \Omega$.

Los conceptos de punto cerrado, punto de acumulación y punto bordeal pueden ser confusos. En la Figura 10 se intenta esquematizar estas definiciones con un ejemplo. Los puntos azules mostrados representan al conjunto X y las figuras curvas de color verde representan la topología τ (evidentemente no se puede presentar al conjunto vacío que también pertenece a τ). El polígono mostrado representa al conjunto Ω . Existen muchos puntos cerrados como F , C y D pues todos los elementos de τ a los que pertenecen tienen alguna intersección con Ω , el polígono. Sin embargo, mientras que C y D son puntos de acumulación, F no lo es pues $\{F, H\} - \{F\}$ no tiene intersección con Ω . El punto W es un punto bordeal, ya que todos los elementos de τ a los que pertenecen tienen una parte interna al polígono y una parte externa.

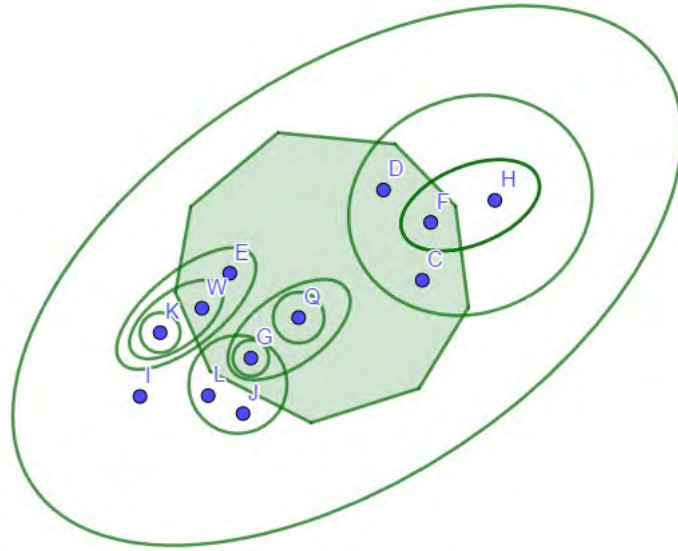


Figura 10: Se ilustra una topología τ por medio de los contornos coloreados de verde y el conjunto Ω como un polígono.

2.5. Análisis Jerárquico de Clusters

El Análisis Jerárquico de Clusters (AJC) es una técnica computacional de agrupamiento. Para ello es necesario describir a los elementos que se desean agrupar mediante un vector de propiedades previamente definidas. De forma general, podemos decir que el AJC requiere dos operaciones fundamentales. La primera de ellas debe permitir evaluar la cercanía entre dos de los elementos y la segunda debe permitir fusionar dos elementos en uno solo. Con estas operaciones definidas, la técnica solo consiste en hallar aquellos 2 elementos más cercanos y fusionarlos, luego se repite esto hasta que el número de elementos es uno [Otto, 2016, cap. 5].

Un primer aspecto a tener en cuenta es que los vectores que representan a los elementos deben estar normalizados. Esto quiere decir que cada una de las propiedades de cada elemento debe estar entre cero y uno. Sea X_A el vector de propiedades del elemento A y X_{jA} la j -ésima propiedad del elemento A . Es necesario transformar X a \tilde{X} (X normalizado), para lo cual se usa la siguiente fórmula:

$$\tilde{X}_{jA} = \frac{X_{jA} - X_{jmin}}{X_{jmax} - X_{jmin}}$$

Donde X_{jmin} y X_{jmax} son los mínimos y máximos de la j -ésima propiedad respectivamente [Otto, 2016, cap. 5].

Una vez que poseemos \tilde{X} , se denotará por Q al espacio normalizado al que pertenecen cada uno de los elementos. Es sobre este espacio que se definirá una forma de medir la cercanía entre dos elementos y una forma de fusionar elementos. Por no sobrecargar la notación, se usará X en lugar de \tilde{X} [Otto, 2016, cap. 5].

Para medir la cercanía entre dos elementos usamos las funciones de similaridad, funciones de similitud o métricas [Otto, 2016, cap. 5]. Existe una gran cantidad de estas para elegir, pero las más comunes son las mostradas en la Tabla 1 [Restrepo et al., 2004].

Tabla 1: Métricas comunes en el AJC [Restrepo et al., 2004].

Métrica	Regla de correspondencia
Distancia de Hamming	$d(X_A, X_B) = \sum_{i=1}^n abs(X_{iA} - X_{iB})$
Distancia euclidiana	$d(X_A, X_B) = \left[\sum_{i=1}^n (X_{iA} - X_{iB})^2 \right]^{1/2}$
Distancia Gower	$d(X_A, X_B) = \left[1 - \frac{\sum_{i=1}^n X_{iA} * X_{iB}}{\sum_{i=1}^n X_{iA}^2 + \sum_{i=1}^n X_{iB}^2 - \sum_{i=1}^n X_{iA} * X_{iB}} \right]^{1/2}$
Similitud coseno	$d(A, B) = \frac{\sum_{i=1}^n X_{iA} * X_{iB}}{\left[\sum_{i=1}^n X_{iA}^2 * \sum_{i=1}^n X_{iB}^2 \right]^{1/2}}$

Para fusionar dos elementos en uno usamos las metodologías de agrupamiento que, de forma general, pueden expresarse mediante la siguiente fórmula [Restrepo et al., 2004].

$$f(k, i) = \alpha_A * f(A, i) + \alpha_B * f(B, i) + \beta * f(A, B) + \gamma * [f(A, i) - f(B, i)]$$

Dependiendo de la metodología de agrupamiento, los parámetros α_A , α_B , β y γ adoptarán diferentes valores. En la Tabla 2 se muestran las metodologías de agrupamiento más comunes.

Tabla 2: Metodologías de agrupamiento comunes en el AJC [Restrepo et al., 2004].

Metodología	α_A	α_B	β	γ
Enlace promedio no ponderado	$\frac{n_A}{n_A+n_B}$	$\frac{n_B}{n_A+n_B}$	0	0
Enlace hacia el centro	$\frac{n_A}{n_A+n_B}$	$\frac{n_B}{n_A+n_B}$	$-\frac{n_A * n_B}{(n_A+n_B)^2}$	0
Enlace completo	0.5	0.5	0	0.5
Enlace simple	0.5	0.5	0	-0.5

Con el fin de explicar mejor el funcionamiento del AJC y los conceptos explicados, se mostrará un ejemplo adaptado de [Flores Turpo, 2019]. Se define un conjunto de elementos $X = \{A, B, C, D\}$ definidos por 4 propiedades (Tabla 3). Se usará la distancia euclidiana y enlace promedio ponderado como función de similitud y metodología respectivamente.

Tabla 3: Información de un conjunto arbitrario de objetos. Adaptado de [Flores Turpo, 2019].

Compuesto	Propiedad 1	Propiedad 2	Propiedad 3	Propiedad 4
A	34.300	3.300	4241.100	0.300
B	30.300	2.600	4532.100	10.230
C	31.230	5.300	8023.100	4.100
D	27.300	10.200	7392.100	5.200

Lo primero que debemos hacer es normalizar cada uno de los elementos, lo cual se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4: Información normalizada de un conjunto arbitrario de objetos. Adaptado de [Flores Turpo, 2019].

Compuesto	Propiedad 1	Propiedad 2	Propiedad 3	Propiedad 4
A	1.000	0.092	0.000	0.000
B	0.429	0.000	0.077	1.000
C	0.561	0.355	1.000	0.383
D	0.000	1.000	0.833	0.493

Para cada uno de los pares de elementos se procede a calcular la distancia euclidea (Tabla 5).

Tabla 5: Matriz de distancias euclidianas. Adaptado de [Flores Turpo, 2019].

	A	B	C	D
A	0.000	1.158	1.187	1.662
B	1.158	0.000	1.173	1.418
C	1.187	1.173	0.000	0.878
D	1.662	1.418	0.878	0.000

Se ha resaltado con un recuadro el valor mínimo obtenido. Este par será fusionado con la metodología de agrupamiento indicada (Tabla 6).

Tabla 6: Matriz de distancias euclidianas luego de la primera iteración. Adaptado de [Flores Turpo, 2019].

	A	B	{C, D}
A	0.000	1.158	1.425
B	1.158	0.000	1.300
{C, D}	1.425	1.300	0.000

Luego se fusionarán A y B y el algoritmo continuará hasta que solo exista un elemento. Todo el proceso descrito puede resumirse en el diagrama mostrado en la Figura 11.

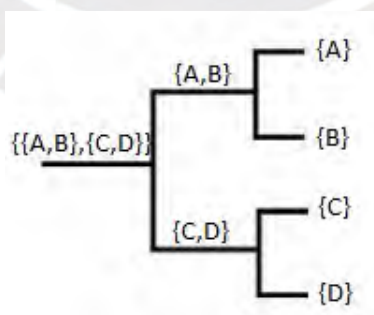


Figura 11: Representación del proceso AJC. Adaptado de [Flores Turpo, 2019].

A este tipo de gráfico se le denomina dendrograma y a los elementos que en algún momento forman un grupo se les denomina cluster. Es importante notar que un dendrograma es un árbol binario. Cada subárbol representa un cluster y los elementos que forman este cluster son las hojas del correspondiente subárbol. Un detalle fundamental es que, dado un entero positivo n menor al número de elementos de X , los n -subárboles maximales del dendrograma forman la base

de una topología. Los conceptos topológicos serán de gran ayuda para explorar las relaciones de similaridad.

2.6. Relaciones Difusas

En un conjunto común, se puede establecer la pertenencia de forma binaria; es decir, se puede indicar que un elemento pertenece o no a un conjunto. En un conjunto difuso, en cambio, existe una función μ definida entre 0 y 1 que indica el grado de pertenencia de un elemento a un conjunto [Zadeh, 1965]. De forma análoga, las relaciones también pueden generalizarse y dar lugar a relaciones difusas; de esta forma, una relación definida sobre el conjunto A tiene asociada una matriz que indica el grado de pertenencia de cada par ordenado. Por ejemplo, sea el conjunto $A = \{a, b, c, d, \dots\}$ y sea R una relación difusa definida sobre A ; la pertenencia de cada par ordenado (μ_R) puede ser expresada con la matriz $[R]$ [Zadeh, 1971].

$$[R] = \begin{bmatrix} \mu_R(a, a) & \mu_R(a, b) & \mu_R(a, c) & \dots \\ \mu_R(b, a) & \mu_R(b, b) & \mu_R(b, c) & \dots \\ \mu_R(c, a) & \mu_R(c, b) & \mu_R(c, c) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Denotemos por $\mu_{R \circ S}$ a la max-min composición de las relaciones difusas R y S definidas en el conjunto A . La max-min composición se define como [Zadeh, 1971]:

$$\mu_{R \circ S}(x, z) = \max_{y \in A} (\min(\mu_R(x, y), \mu_S(y, z)))$$

Una relación es max-min transitiva si $\mu_R \geq \mu_{R \circ R}$, o equivalentemente:

$$\mu_R(x, z) \geq \max_{y \in A} (\min(\mu_R(x, y), \mu_R(y, z)))$$

Una relación difusa de equivalencia definida sobre A es aquella que es reflexiva, simétrica y max-min transitiva. En el contexto de las relaciones difusas, estas son reflexivas si $\mu_R(x, x) = 1$ para todo x que pertenece a A . Son simétricas si $\mu_R(x, y) = \mu_R(y, x)$ para todo x e y que pertenecen a A . Una relación que solo es simétrica y reflexiva es una relación compatible [Zadeh, 1971].

Se dice que la relación S es más pequeña o está contenida en la relación R si $\mu_S \leq \mu_R$. Una relación es max-min cerrada transitiva sobre la relación compatible R si es la relación max-min transitiva más pequeña que contiene a R [Klir y Yuan, 1995].

Con las anteriores definiciones podemos enunciar un teorema muy útil. Sea R una relación difusa compatible definida sobre el conjunto A que posee n elementos, entonces su relación max-min transitiva cerrada R_T es igual a R^{n-1} , donde R^{n-1} es la relación $R \circ R \circ R \dots R$ ($n-1$ veces) [Klir y Yuan, 1995].

La relación max-min transitiva cerrada R_T de R definido sobre A tiene la capacidad de agrupar a los elementos de A . Para ello, es necesario definir un parámetro α . La relación R_T^α vale 1 para los pares que están en un mismo grupo y 0 para los pares que están en grupos diferentes. El parámetro α es conocido como el grado de similaridad.

$$\mu_{R_T^\alpha}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu_{R_T} \geq \alpha \\ 0 & \text{si } \mu_{R_T} < \alpha \end{cases}$$

Como ejemplo podemos definir el conjunto $X = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ junto con una relación difusa R .

$$[R] = \begin{bmatrix} 1 & 0.65 & 0.1 & 0.21 & 0 \\ 0.65 & 1 & 0.44 & 0.5 & 0.21 \\ 0.1 & 0.44 & 1 & 0.44 & 0.1 \\ 0.21 & 0.5 & 0.44 & 1 & 0.65 \\ 0 & 0.21 & 0.1 & 0.65 & 1 \end{bmatrix}$$

Luego componemos 4 veces R para obtener R_T

$$[R_T] = \begin{bmatrix} 1 & 0.65 & 0.44 & 0.5 & 0.5 \\ 0.65 & 1 & 0.44 & 0.5 & 0.5 \\ 0.44 & 0.44 & 1 & 0.44 & 0.44 \\ 0.5 & 0.5 & 0.44 & 1 & 0.65 \\ 0.5 & 0.5 & 0.44 & 0.65 & 1 \end{bmatrix}$$

Por último, tomando $\alpha = 0.45$ se tiene

$$[R_T^{0.45}] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

A continuación se listan todos los posibles agrupamientos que podrían obtenerse en función de α .

- Primer agrupamiento $\alpha \in [0.65, 1] : \{\{x_1\}, \{x_2\}, \{x_3\}, \{x_4\}, \{x_5\}\}$
- Segundo agrupamiento $\alpha \in [0.5, 0.65] : \{\{x_1, x_2\}, \{x_3\}, \{x_4, x_5\}\}$
- Tercer agrupamiento $\alpha \in [0.44, 0.5] : \{\{x_1, x_2, x_4, x_5\}, \{x_3\}\}$
- Cuarto agrupamiento $\alpha \in [0, 0.44] : \{\{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}\}$

Como se puede observar, cada agrupamiento se forma fusionando elementos del agrupamiento anterior, excepto el primero que corresponde a todos los elementos separados. Los árboles de partición representan cómo determinado agrupamiento cambia al agrupamiento siguiente con la unión de algunos de sus elementos [Lee, 2004]. Para el ejemplo anterior, el árbol de partición se muestra en la Figura 12. No debemos confundir a los árboles de partición con los dendrogramas, ambos representan agrupamientos pero siguiendo diferentes técnicas; además, los dendrogramas siempre son árboles binarios, esta característica no tiene por qué cumplirse en los árboles de partición.

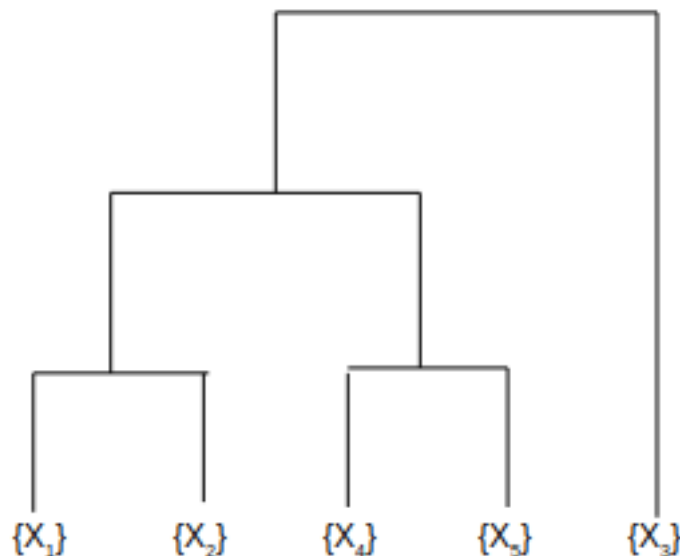


Figura 12: Se muestra el árbol de partición del conjunto X .

2.7. Redes Neuronales

Las redes neuronales son herramientas poderosas que han logrado tener aplicaciones en una gran cantidad de áreas [Heaton, 2008, cap. 1]. De forma simplificada, podemos decir que una red neuronal es una red compuesta de elementos simples de procesamiento llamados neuronas. El funcionamiento de una neurona es bien sencillo; simplemente recibe varias señales y las transforma en una única señal de entrada que luego transforma con una función de transferencia. La señal resultante es transmitida a otra neurona. Las diferentes señales que llegan a la neurona tienen asociadas un peso. Como resultado aquellas señales con mayor peso tienen mayor impacto en la señal de entrada resultante.

$$I_j = \sum_{i=0}^n W_{ij} X_i$$

$$Y_j = f(I_j)$$

I_j es la señal de entrada resultante en la neurona j , W_{ij} es el peso en la transferencia de la neurona i a la neurona j , X_i es la señal transmitida por la neurona i , Y_j es la señal que transfiere la neurona j y f es la función de transferencia. En la Figura 13 se representan estas variables.

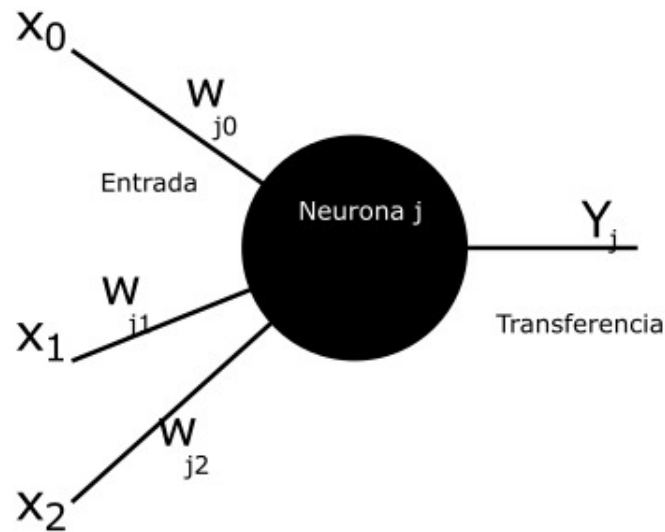


Figura 13: Representación del funcionamiento de una neurona. Se representa una neurona j junto con las señales que llegan a ella, sus pesos y la señal que esta transmite. Adaptado de [Dougherty, 1995].

Una única neurona no es capaz de hacer grandes transformaciones. Para que una red neuronal pueda modelar sistemas complejos es necesario manejar gran cantidad de neuronas como se muestra en la Figura 14. Los pesos de las transferencias pueden modificarse para obtener un mejor modelo; las redes neuronales son capaces de modificar sus pesos mediante una regla de aprendizaje [Dougherty, 1995].

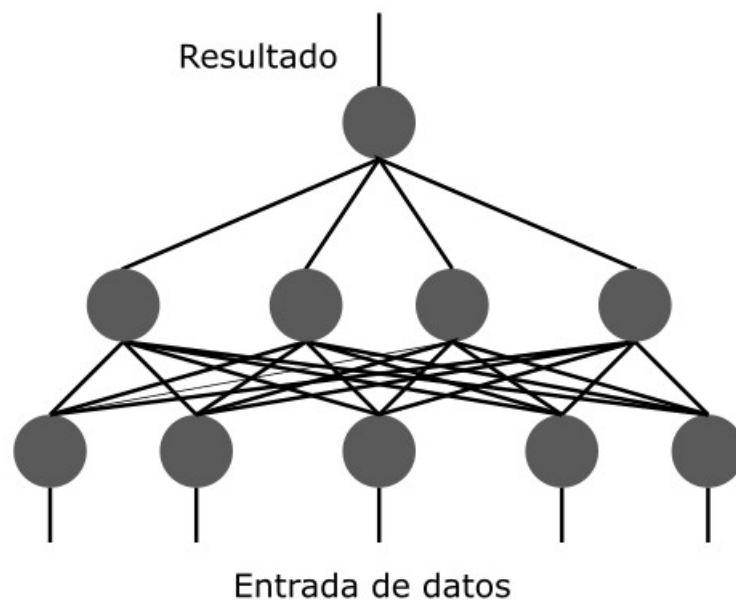


Figura 14: Se muestra una red neuronal [Dougherty, 1995].

Al proceso en el que una red neuronal modifica sus pesos se le conoce como entrenamiento y este puede ser supervisado o no supervisado. En un entrenamiento supervisado es necesario poner en la red neuronal como entrada casos de prueba, es decir, casos en los que uno espera determinada respuesta. La red neuronal usa su regla de aprendizaje para evolucionar y even-

tualmente sus resultados deben ser muy similares a las respuestas esperadas de los casos de prueba. De esta forma es como operan la mayoría de redes neuronales. Por otro lado, en un entrenamiento no supervisado no existen entradas con una respuesta esperada. Estas redes neuronales se usan comúnmente cuando se desea clasificar objetos y es el trabajo de esta descubrir la clasificación.

2.7.1. Redes Neuronales de Kohonen

Las redes neuronales de Kohonen o los mapas autoorganizados son redes neuronales de aprendizaje no supervisado. Comúnmente son usados para transformar un espacio con una dimensión alta a un espacio discreto de menor dimensión. Supongamos que se trabaja en un espacio de dimensión n que se desea transformar a un espacio de dimensión 1; será necesario definir un conjunto de m vectores denominados neuronas o vectores peso w_1, w_2, \dots y w_m los cuales pertenecen al espacio de dimensión n . Se dice que el vector w_{i-1} se encuentra a la izquierda del vector w_i , mientras que w_{i+1} está a la derecha. Los vectores pesos cambian en función de un algoritmo de aprendizaje. Al final de este proceso, todo punto del espacio de dimensión n será representado por el vector peso más cercano a este. Un ejemplo puede ser observado en la Figura 15, donde un espacio triangular ha sido transformado a un espacio discreto de dimensión 1 [Rojas, 2013, cap. 15].

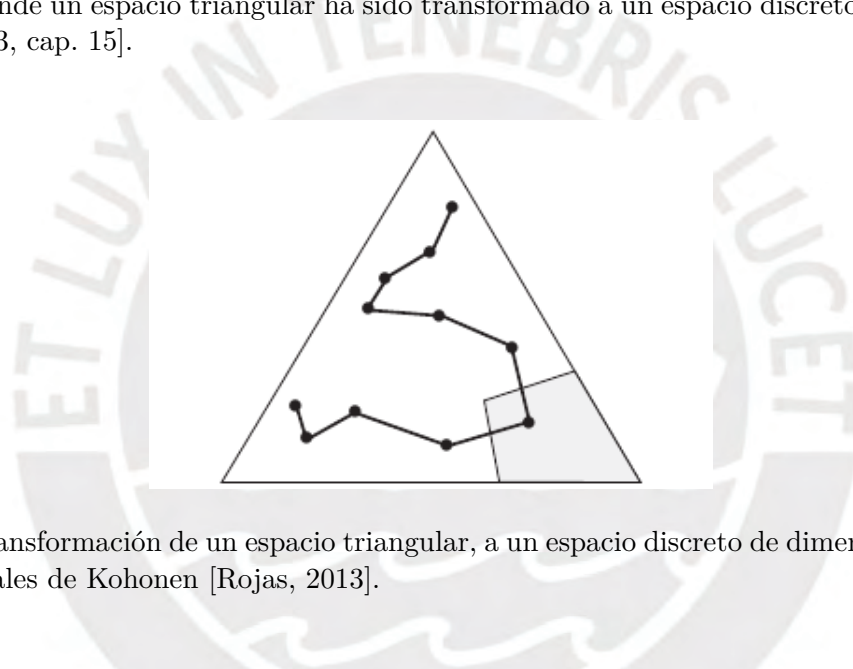


Figura 15: Transformación de un espacio triangular, a un espacio discreto de dimensión 1 usando redes neuronales de Kohonen [Rojas, 2013].

La primera etapa de este proceso de aprendizaje es definir un nuevo espacio sobre el que se proyectará el espacio estudiado y los vectores peso que pueden ser aleatorios. También es necesario definir una función de aprendizaje η , que debe ser decreciente, y una función de vecindad ϕ . Luego se toma un punto aleatorio del espacio estudiado ϵ y se halla el vector peso más cercano w_k ; cada vector peso w_i cambia a $w_i + \eta\phi(w_i, w_k)(\epsilon - w_i)$. Posteriormente se elige otro punto aleatorio en el espacio y de igual manera los vectores peso son modificados. Este proceso se repetirá varias veces y el valor de η cambiará según un valor i , el número de la iteración en la que se encuentra el programa [Rojas, 2013, cap. 15]. A continuación, se describirá el proceso anterior por un pseudocódigo:

```

Generar lista W de vectores peso de forma aleatoria;
Definir la función de vecindad  $\phi$ ;
Definir la función de aprendizaje  $\eta$ ;
Definir N, cantidad de iteraciones deseadas;
para cada  $i$  en el rango  $[1, N]$  hacer
    Elegir un punto aleatorio del espacio  $\epsilon$ ;
    Encontrar  $w_k$ , el vector peso más cercano a  $\epsilon$ ;
    para cada vector peso  $w_i$  en  $W$  hacer
         $w_i = w_i + \eta(i)\phi(w_i, w_k)(w_i - \epsilon)$ ;
    fin
fin

```

3. Revisión de los Estudios de Similaridad

Mendeleev escribió en sus artículos que la razón por la cual no se conoce una función analítica para representar la ley periódica es porque esta pertenece a un ámbito de las matemáticas aún inexplorado [Restrepo, 2018]. No es de extrañar entonces que, en caso Mendeleev tenga razón y no existan aún estas matemáticas, las herramientas más importantes que tengamos para explorar la similitud de los elementos químicos sean métodos estadísticos.

Una de las aproximaciones que hay para explorar el sistema periódico, que probablemente es la metodología más desarrollada hoy en día, surge de forma conceptual en el año 2000. En *Química y Epistemología, una relación esquivada*, Villaveces indica que los elementos químicos son parte de un espacio topológico donde cada elemento de la topología corresponde a un conjunto de elementos químicos con cierto grado de similaridad, es decir, además de existir similaridad, existen similaridades más íntimas que otras [Cardoso, 2000]. A la existencia de esta estructura hoy en día se le conoce como Conjetura de Villaveces [Restrepo, 2018].

Existen muchos patrones entre la similaridad de los elementos químicos. Los elementos químicos de una misma familia comparten gran cantidad de propiedades químicas, esto se cumple en gran medida en los bloques s y p de la Tabla Periódica. Además de este patrón, que es muy conocido, destacan otros como el principio de singularidad, la relación diagonal, el movimiento de caballero, la periodicidad secundaria y la relación del grupo n y $n + 10$, entre otras [Rayner-Canham, 2000, Ostrovsky, 2001, Leal et al., 2012].

El principio de singularidad indica que la química de los elementos del segundo periodo frecuentemente difiere con la de los elementos del mismo grupo más tardíos [Leal et al., 2012]. La relación diagonal indica que es frecuente encontrar similaridades entre un elemento y el que se encuentra abajo a la derecha [Rayner-Canham, 2000]. El movimiento de caballero indica que algunos elementos muestran similaridad con aquellos que están en un periodo posterior y 2 grupos posteriores, como el movimiento del caballero en ajedrez [Rayner-Canham, 2000]. La periodicidad secundaria indica que existe similaridad entre elementos de un periodo m y $m+2$ [Ostrovsky, 2001]. Por último, también se ha reportado la similaridad entre elementos un grupo n y $n + 10$ [Rayner-Canham, 2000].

3.1. Estudios basados en Relaciones Difusas

3.1.1. Zhou 2000

En [Zhou X. Z., 2000] se construyó una relación difusa sobre el conjunto de 50 elementos químicos. Para ello los elementos químicos fueron descritos en base a 7 propiedades físicas, las cuales son densidad, diámetro atómico, entalpía de atomización, punto de fusión, punto de ebullición, electronegatividad y conductividad térmica. Sea X el conjunto de los elementos

químicos y x_i una representación general de cada elemento, además x_{ji} representa la j -ésima propiedad del elemento x_i .

$$\mu(x_i, x_k) = \frac{\sum_{j=1}^n x_{ji}x_{jk}}{\sqrt{\sum_{j=1}^n x_{ji}^2 \sum_{j=1}^n x_{jk}^2}}$$

Finalmente se calculó la relación max-min transitiva cerrada y se construyó el árbol de partición, el cual es mostrado en la Figura 16.

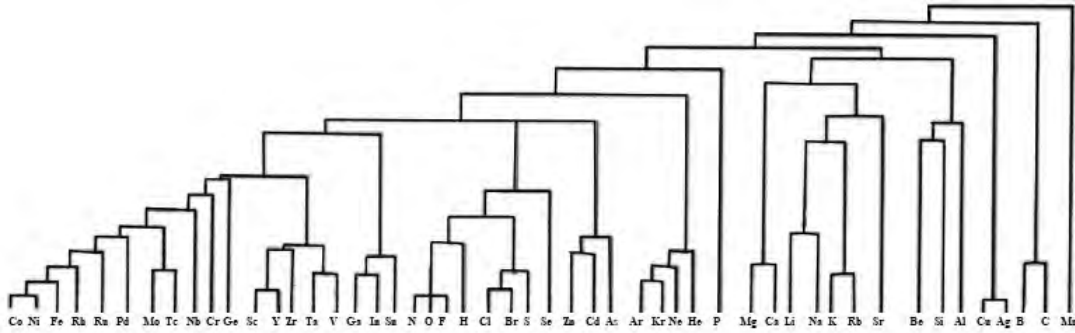


Figura 16: Árbol de partición obtenido en [Zhou X. Z., 2000]. Adaptado de [Zhou X. Z., 2000].

Los agrupamientos mostrados tienen ciertas anomalías; por ejemplo, el Mn es el menos similar al resto de los elementos, salvo en el último nivel, nunca se agrupa con otros elementos. Se observa la similitud entre el Be y Al , típica relación diagonal, pero junto a este grupo, el Si también se muestra como un elemento similar. También se observa que el Sr se encuentra muy alejado del resto de alcalinos térreos.

3.1.2. Karakasidis & Georgou 2004

En [Karakasidis y Georgiou, 2004] se construyó una relación difusa sobre el conjunto de elementos químicos para poder clasificarlos. Sea X el conjunto de elementos, x_i representa un elemento tal que $x_i \in X$, donde i va de 0 a n (el número de elementos considerados). Cada x_i está constituido por m propiedades tal que $x_i = \{x_{0i}, x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{mi}\}$, donde m es el número de propiedades con las que se describe cada elemento. Luego, cada entrada en la matriz de la relación difusa se define como

$$\mu(x_i, x_k) = 1 - \frac{(\sum_{j=1}^m |x_{ji} - x_{jk}|^2)^{\frac{1}{2}}}{d}$$

donde d es

$$d = \max_{1 \leq i, k \leq n} \left(\sum_{j=1}^m |x_{ji} - x_{jk}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Se construyó la relación difusa con 2 propiedades físicas, la energía de ionización y el número atómico. Finalmente se construyó la relación max-min transitiva cerrada y se clasificó con el grado de similitud $\alpha = 0.9451110$, obtuyéndose:

$$\begin{aligned} & \{H\} \\ & \{He\} \\ & \{Li, Be, B, C, N, O, F, Ne\} \\ & \{Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar\} \\ & \{K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr\} \end{aligned}$$

$$\{Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe\}$$

$$\{Cs, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, Rn\}$$

$$\{Ra, Ac\}$$

Los agrupamientos generados son prácticamente idénticos a los periodos de la Tabla Periódica, con la única diferencia en que el H y He se encuentran en grupos diferentes.

3.2. Estudios basados en Redes Neuronales de Kohonen

3.2.1. Chen 2010

Chen en 2010 estudió 54 de los elementos químicos mediante 10 propiedades tanto físicas como químicas. Estas propiedades fueron masa atómica, mínimo estado de oxidación, máximo estado de oxidación, radio atómico, electronegatividad, estado de materia, punto de fusión, punto de ebullición, calor de atomización y energía de ionización. Los elementos estudiados se proyectaron a un espacio discreto bidimensional de 12 x 8 casillas [Chen, 2010].

Los principales resultados fueron que los metales se ubicaron en la parte superior, los no metales en la parte inferior y los metaloides en una región intermedia como se muestra en la Figura 17.

Nb, Tc, Mo	Ru	Rh	Y	Sc	Al, Be		Zn	Sr		Ca	Mg, Li	0
	Zr					Ga		Rb	K	Na		1
		Ti	Co, Ni, Fe		Cu							2
	V		Ge	Pd	Ag		Cd			Kr	Ar	3
B		Cr	Mn			Sn	In		Xe			4
				Sb							Ne, He	5
C	Si				Te		Br			H		6
		S, P	As, Se		I		Cl	N		O, F		7
0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	

Figura 17: Clasificación de 54 elementos usando redes neuronales de Kohonen. En azul se resalta a los elementos metálicos, en rojo a los no metálicos y en verde a los metaloides [Chen, 2010].

Los elementos metálicos más reactivos se encuentran por la parte superior derecha, como el los alcalinos y alcalinos térreos, mientras que otros más inertes como Ag, Cu, Sn, Cd, In y Pd se encuentran en el centro. Se pueden identificar relaciones diagonales como (Mg, Li) y (Be, Al) y también se destaca la similitud en las ternas (Co, Ni, Fe) y (Nb, Tc, Mo). Por el lado de los no metales, los gases nobles se encuentran cercanos entre ellos. También destacan los halógenos, ubicados en la parte inferior derecha, aunque F y I están distantes entre ellos, el Cl y Br se encuentran justo en el medio. En el caso del B y O se nota lo diferenciados que son respecto a los demás elementos de sus grupos, como sugiere el principio de singularidad.

3.3. Estudios basados en el Análisis Jerárquico de Clusters

3.3.1. Sneath 2000

El primer intento de clasificar a los elementos siguiendo el análisis jerárquico de clusters fue llevado a cabo por Sneath en el año 2000 [Sneath, 2000]. La función de similaridad usada fue la métrica de Gower y la metodología de agrupamiento fue el centro de masa del conjunto de puntos; con lo cual se llevó a cabo la construcción de un dendrograma, el mostrado en la Figura 18. Se trabajó con 69 elementos y 54 propiedades.

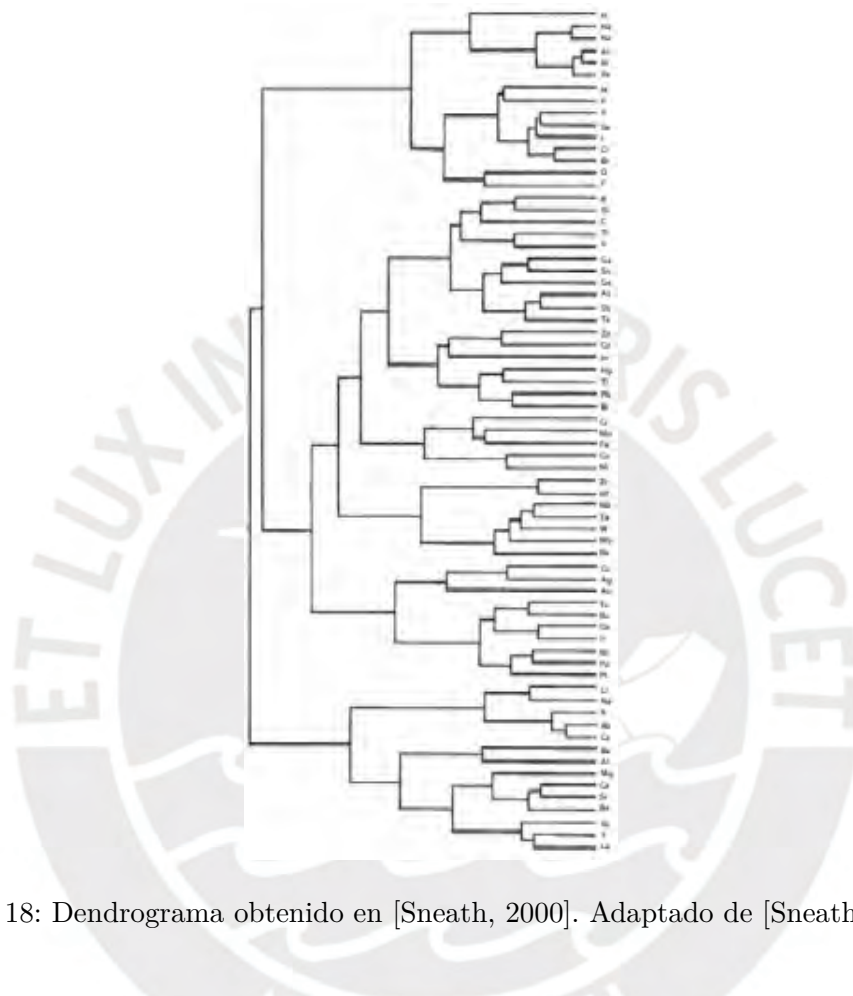


Figura 18: Dendrograma obtenido en [Sneath, 2000]. Adaptado de [Sneath, 2000].

El análisis de Sneath se centró en los principales grupos que se podían indentificar en su dendrograma y los principales subgrupos en cada uno de estos. De esta forma, el primer grupo contiene a los halógenos, gases nobles, oxígeno, azufre, selenio, nitrógeno, fosforo e hidrógeno. El primer subgrupo corresponde al hidrógeno y los gases nobles; el segundo a los halógenos (sin flúor), con nitrógeno, fósforo, azufre y selenio; y el último subgrupo corresponde únicamente a oxígeno y flúor. De forma similar se definen los siguientes grupos y sus respectivos subgrupos.

Un aspecto que se puede destacar es que cerca del 25 % de la data usada estaba incompleta, por lo que se usó la interpolación de Lagrange para completarla. Por otro lado, su análisis muestra ciertas irregularidades, como por ejemplo la relación existente entre los halógenos y el oxígeno; o el azufre y el selenio con el yodo; así como la asociación de titanio y vanadio con boro que también es inesperada (esto se puede verificar en la Figura 18). Sin embargo, los gases nobles, metales alcalinos, alcalinos térreos, halógenos y lantánidos mostraron la similaridad esperada entre sus elementos.

3.3.2. Restrepo 2004

Restrepo en 2004 hizo importantes mejoras a la metodología seguida por Sneath. Lo más relevante es que introdujo conceptos topológicos y a la metodología utilizada se le conoce hoy en día como quimiología [Restrepo et al., 2004].

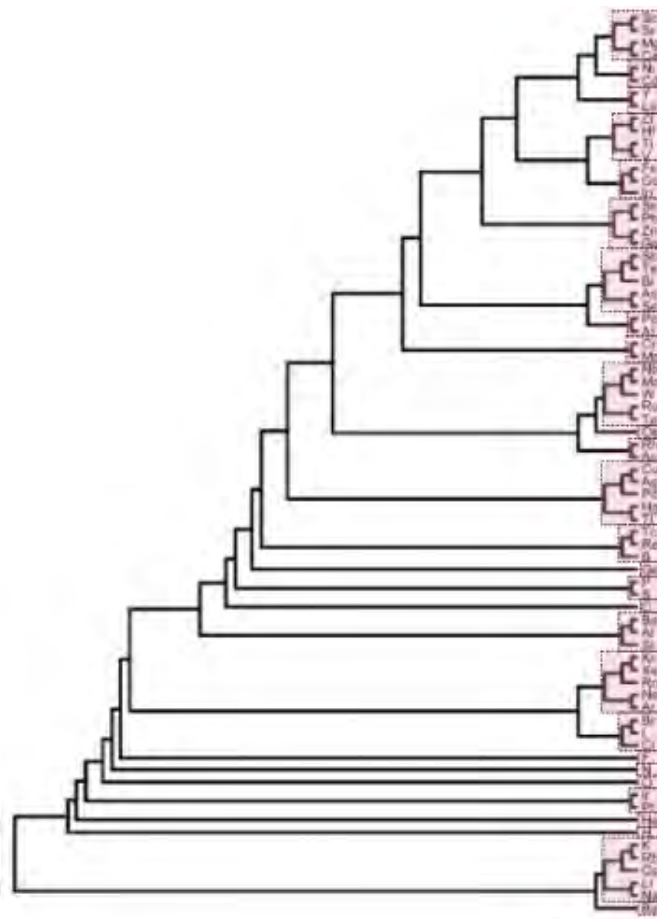
Se trabajó con 72 elementos químicos y 31 propiedades fisicoquímicas. Solo el 1.6% de la data era desconocida y se usó la interpolación de Lagrange para completarla. Las funciones de similaridad usadas fueron las mostradas en la Tabla 1 y las metodologías de agrupamiento fueron las mostradas en la Tabla 2. Por cada metodología de agrupamiento se construyeron 4 dendrogramas, cada uno usando una diferente función de similaridad. De esta forma, se llegó a la construcción de 16 dendrogramas. La información de estos se fusiona en una única estructura denominada el árbol consenso (existen muchas formas de definir a los árboles consensos, se usó el árbol consenso de Adams). Finalmente, se analizaron las similaridades a partir de los dendrogramas individuales y se compararon con la del árbol consenso. En la Figura 19(a) se muestra el dendrograma obtenido al usar la similitud coseno y el enlace simple como función de similaridad y metodología de agrupamiento, respectivamente. En 19(b) se muestra el árbol consenso de los 16 dendrogramas obtenidos; además, se han resaltado los 5-subárboles maximales.

Si bien este trabajo muestra interesantes resultados, puede ser entendido mejor como una metodología para que cada uno pueda hacer interpretaciones sobre la similaridad de los elementos de cualquier conjunto deseado; para entender mejor este punto, se mostrarán algunos ejemplos.

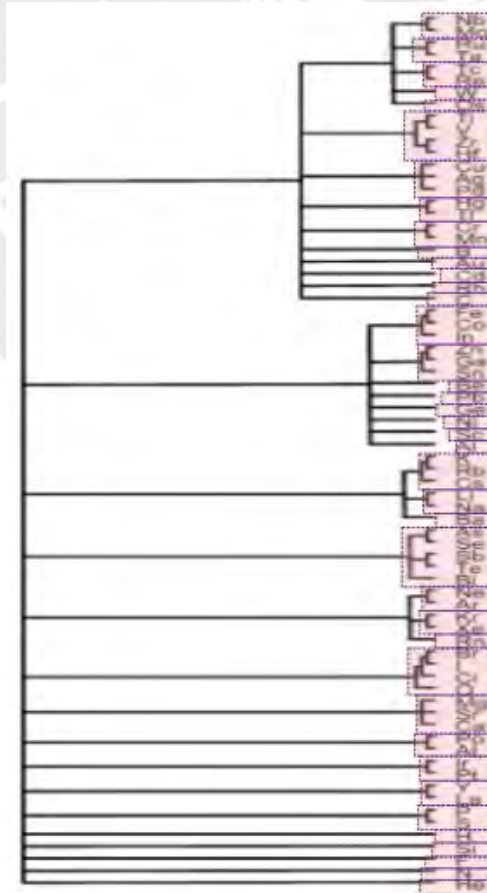
Podemos analizar el conjunto de elementos alcalinos $A = \{Li, Na, K, Rb, Cs\}$ con el dendrograma de la Figura 19(a) usando los 5-subárboles maximales. Tenemos que $\bar{A} = \{Li, Na, K, Rb, Cs\}$, $A' = \{Li, Na, K, Rb, Cs\}$ y $b(A) = \emptyset$. Como $\bar{A} = A$, podemos decir que todos los elementos similares al conjunto A son los mismos elementos alcalinos; al mismo tiempo como $A' = A$ cada metal alcalino es similar a algún otro metal alcalino; también podemos decir que no existe un metal alcalino similar a un elemento externo al conjunto, ya que $b(A) = \emptyset$. Por lo anterior, podemos decir que los metales alcalinos son fuertemente similares entre ellos y están claramente diferenciados de algún otro elemento. En este caso, los resultados son idénticos cuando se usa el árbol consenso de la Figura 19(b).

Si analizamos al conjunto $D = \{Fe, Ru, Os\}$, grupo 8, tenemos que $\bar{D} = \{Fe, Ru, Os, Co, In, Nb, Mo, W, Ta\}$; esto sugiere que estos elementos están poco relacionados con los grupos del Ni y Co ; por el contrario, son similares a otros elementos, destacando el In que ni siquiera es un metal de transición. Pero si consideramos el árbol consenso, la similaridad con Nb y Mo se pierde; este tipo de diferencias ocurre constantemente al analizar conjuntos de los metales de transición, por lo que para considerar información representativa, es mejor utilizar el árbol consenso si se desea analizar conjuntos de metales de transición.

Un último ejemplo, también significativo, es el conjunto de todos los elementos metálicos. En este caso es interesante analizar $b(M) = \{Be, Tc, Re, B, Al, Si, As, Sb, Bi, Se, Te, Po, At\}$. Como se puede verificar, hay muchos elementos semimetálicos en el conjunto bordeado, la presencia del Be tampoco es de extrañar ya que es conocida su similaridad con Al por su relación diagonal. Esto refleja que los elementos semimetálicos están en la frontera entre los elementos metálicos y no metálicos. Hay casos anómalos como el Tc y Re , los cuales dejan de aparecer cuando se considera la topología generada por el árbol consenso $b(M) = \{As, Sb, Bi, Se, Te, Po\}$; sin embargo, también se pierden elementos semimetálicos.



(a)



(b)

Figura 19: Se muestran un dendrograma y un árbol consenso obtenido [Restrepo et al., 2004]. Se han resaltado los 5-subárboles maximales. Adaptado de [Restrepo et al., 2004].

3.3.3. Restrepo 2006

En 2006 Restrepo publicó un nuevo artículo aplicando la misma técnica pero ahora evaluando 72 elementos con 128 propiedades (57 propiedades químicas, 50 propiedades geoquímicas y 21 propiedades fisicoquímicas). Se puede destacar que se usó una gran cantidad de nuevas propiedades esencialmente químicas [Restrepo et al., 2006]. Otra diferencia respecto a su trabajo anterior es que esta vez solo consideró la topología generada por el árbol consenso, el cual se muestra en la Figura 20. Al igual que en el trabajo anterior se obtuvo la base del espacio topológico con los 5-subárboles maximales; estos subárboles han sido resaltados en la Figura 20.

Nuevamente, este trabajo pretende plantear una metodología para poder examinar las propiedades de similaridad de cualquier conjunto que se desee. Los resultados obtenidos son más afines al conocimiento químico empírico que se tiene de los elementos, pudiendo identificar varios ejemplos del principio de singularidad.

Por ejemplo para los metales alcalinos $A = \{Li, Na, K, Rb, Cs\}$ tenemos $\bar{A} = A$, $A' = \{Na, K, Rb, Cs\}$ y $b(A) = \emptyset$. El hecho de que el Li no aparezca en A' es evidencia de que es el menos similar a los metales alcalinos, como es de esperar por el principio de singularidad; sin embargo, los metales alcalinos aún pueden considerarse como un conjunto con nula similaridad con los elementos externos a este por su conjunto bordeal.

Para el conjunto de halógenos $H_A = \{F, Cl, Br, I\}$ tenemos que $\bar{H}_A = H_A$, $H'_A = \{Cl, Br, I\}$ y $b(H_A) = \emptyset$. Este caso es muy similar al de los metales alcalinos, incluso también es verificable el principio de singularidad. Si extendemos el conjunto para formar a los elementos del grupo 17, $G_F = \{F, Cl, Br, I, At\}$, tenemos que $\bar{G}_F = \{F, Cl, Br, I, At, Po\}$, $G'_F = \{Cl, Br, I, Po\}$ y $b(G_F) = \{At, Po\}$; por lo tanto, al introducir At a los halógenos el Po sería un elemento muy similar a estos; por lo que es correcto excluir al At de los halógenos.

Explorando a los elementos no metálicos de la tabla, M_N , tienen $b(M_N) = \{B, C, N, Si, P, S, Se, Te, Po, At\}$; este conjunto posee gran cantidad de elementos semimetálicos y elementos no metálicos muy cercanos a los semimetales en la Tabla Periódica.

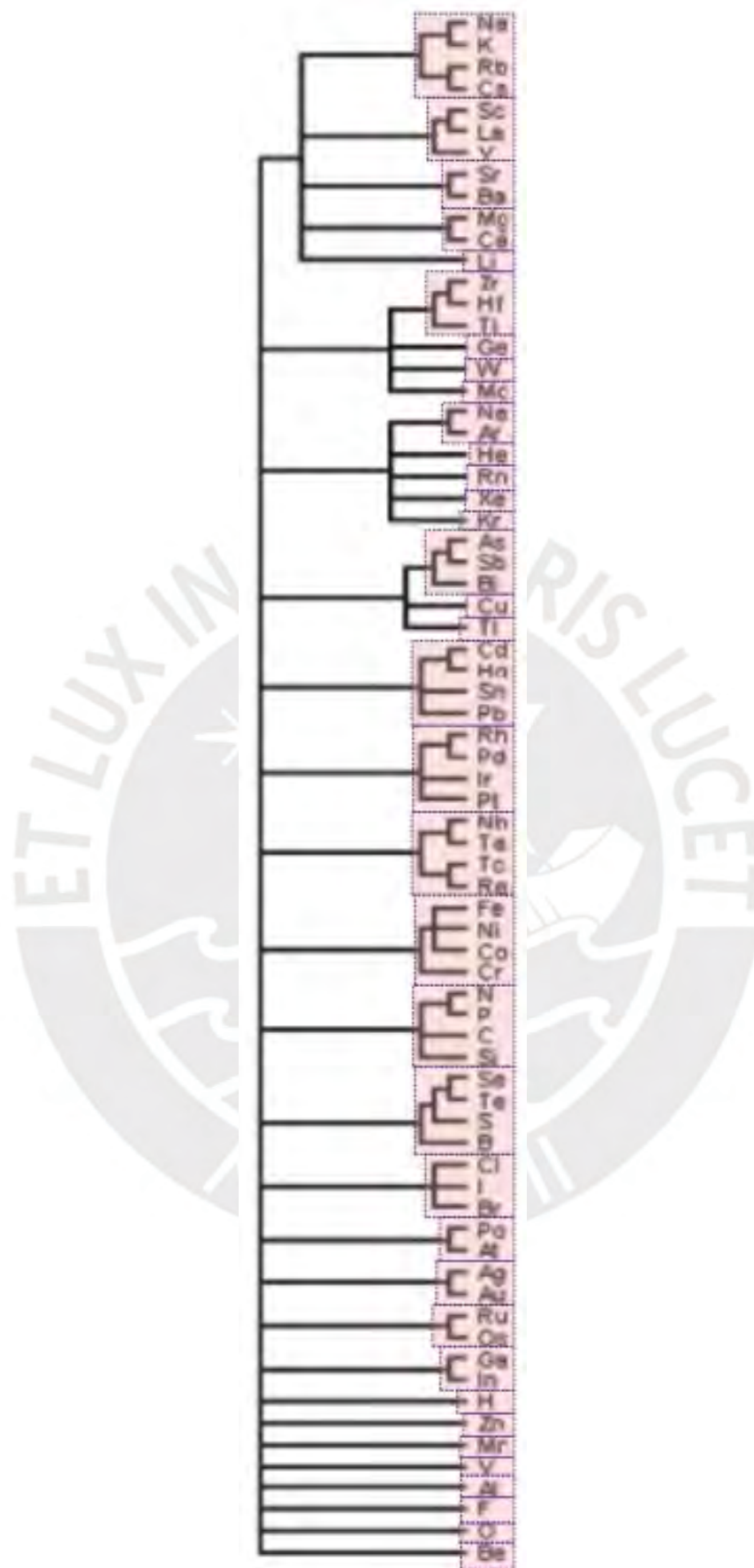


Figura 20: Árbol consenso obtenido en [Restrepo et al., 2006]. Se han resaltado los 5-subárboles maximales. Adaptado de [Restrepo et al., 2006].

3.3.4. Leal 2012

En 2012 Leal refinó la metodología al optimizar la base con la que se construye el espacio topológico; pero lo más resaltante de su trabajo es que solo utilizó propiedades químicas, específicamente centrándose en la estequiometría de los compuestos binarios que pueden formar los elementos químicos, tal y como lo hizo el mismo Mendeleev [Leal et al., 2012].

Se modeló un grafo en el que cada uno de los vértices son los elementos químicos asociados a una relación estequiométrica. Por ejemplo si existe un compuesto X_aY_b , entonces deben existir los vértices $(X, \frac{a}{b})$ y $(Y, \frac{b}{a})$. Además, la existencia del compuesto X_aY_b también implica que haya una arista entre los vértices $(X, \frac{a}{b})$ y $(Y, \frac{b}{a})$. Finalmente es necesario poder establecer una función de similitud para proceder con la metodología, para ello se define la vecindad del elemento X , $C(X)$, como el conjunto de pares $Y, \frac{a}{b}$ tales que existe el compuesto binario X_bY_a . Para medir una cercanía entre dos elementos químicos X e Y se calcula $X \ominus Y$, la diferencia simétrica de los conjuntos $C(X)$ y $C(y)$. La similitud entre estos elementos se mide finalmente con la cantidad de elementos en este último conjunto. Con lo anterior establecido, se procede a construir el dendrograma, el cual se muestra en la Figura 21.



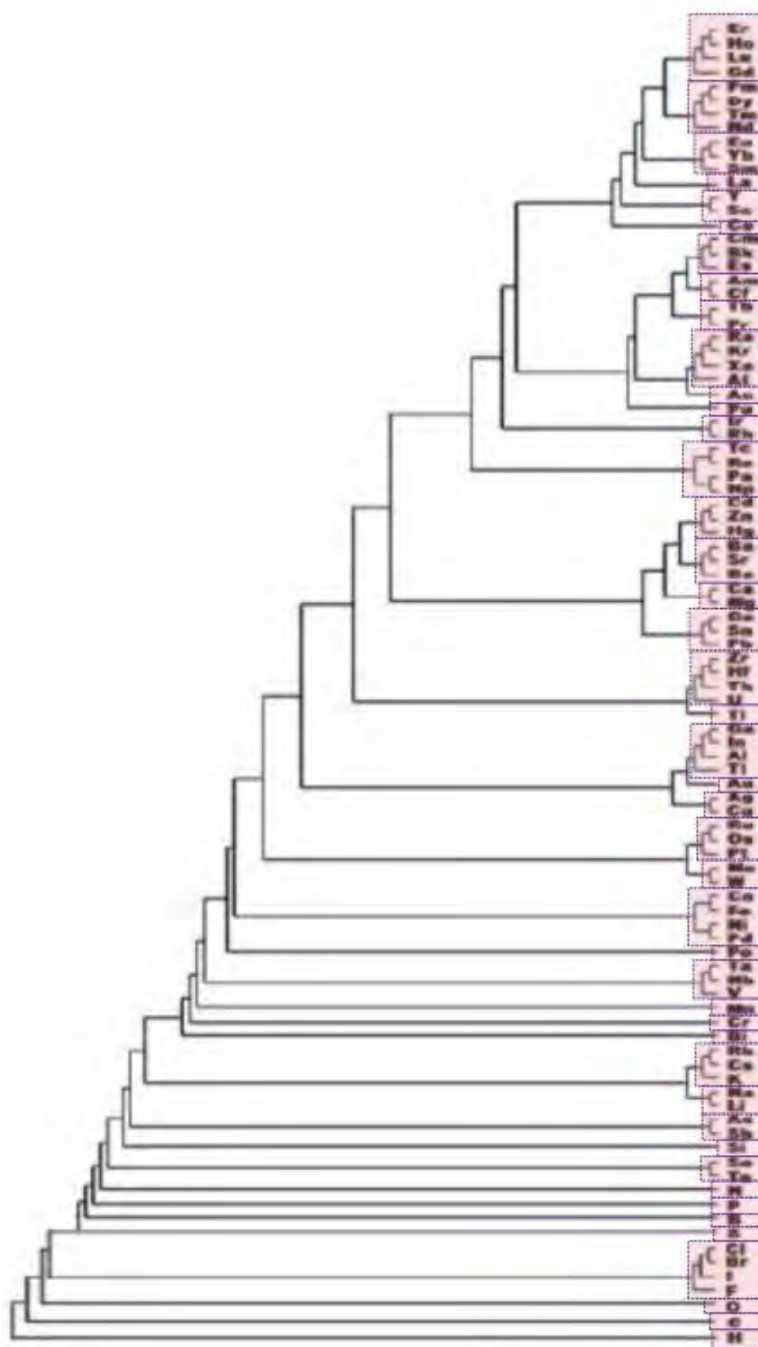


Figura 21: Dendrograma obtenido en [Leal et al., 2012]. Se han resaltado los 4-subárboles maximales. Adaptado de [Leal et al., 2012].

Para inducir una base topológica óptima se maximizó el número de selección S_n . Esta magnitud cuantifica el número de similitudes y disimilitudes establecidas.

$$S_n = K_n \prod_i |K_n(i)|$$

Donde K_n es el número de n-subárboles maximales y $K_n(i)$ es el i-ésimo n-subárbol maximal. Con esto se determinó que la mejor base topológica se da cuando $n=4$. Los 4-subárboles maximales han sido resaltados en la Figura 21.

De forma similar a los trabajos anteriores se puede verificar que los metales alcalinos y halógenos son grupos robustos, es decir, que no muestran similitud con elementos externos

a ellos mismos. Sin embargo, en este trabajo se pudo identificar más grupos robustos como los alcalinos térreos, nitrogenoides y calcógenos. El principio de singularidad es más evidente, pues cada uno de los conjuntos $\{0\}$, $\{N\}$, $\{C\}$ y $\{B\}$ son elementos de la base topológica.

Se identificaron similitudes por movimiento de caballero como $Ru - Pt$, $Fe - Pd$, además de muchos ejemplos de periodicidad secundaria $Xe - Ra$, $Kr - At$, $Tc - Pa$, $Tc - Np$, $Zr - Th$, $Zr - U$.

3.3.5. Leal 2019

En este estudio Leal propuso una estructura formal del sistema periódico. Su principal aporte fue profundizar en la dimensión menos explorada del sistema periódico, el orden. Como ya se desarrolló, todo sistema periódico se construye a partir de definir entre sus elementos un orden y una similitud. En todos los estudios anteriormente mencionados se exploró mediante diferentes técnicas la similitud entre los elementos sin profundizar en su orden, probablemente por la muy arraigada idea de que los elementos están muy bien ordenados por sus números atómicos Z .

Concretamente, si E es el conjunto de elementos químicos, P es un conjunto de propiedades que permiten establecer una relación de similitud entre los elementos C_P y \preceq_Z un ordenamiento basado en los números atómicos de los elementos, podremos definir un sistema periódico Mendeleeviano (E, C_P, \preceq_Z) [Leal y Restrepo, 2019].

Es posible ordenar los elementos químicos por muchas otras variables, por ejemplo, se podrían ordenar mediante su masa m_a . Incluso podríamos ordenarlos por su masa y al mismo tiempo por su número atómico, aunque al ordenarlo por más de una variable pasaríamos de un orden total a un orden parcial. En la figura 22 se ilustra el ordenamiento de un conjunto de elementos por su número atómico, por su masa atómica y por ambas variables mediante diagramas de Hasse [Leal y Restrepo, 2019].

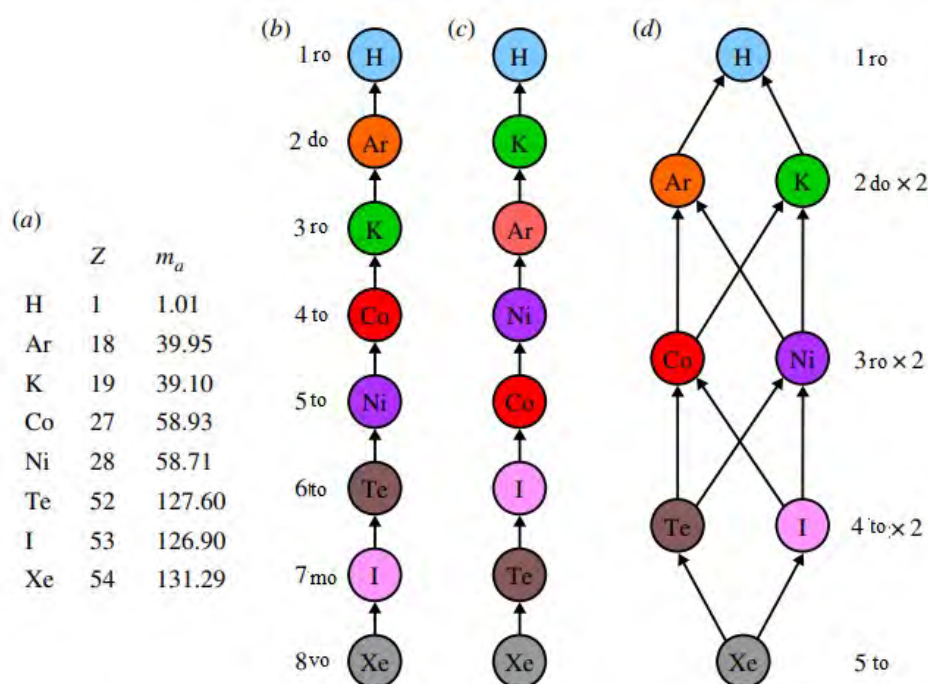


Figura 22: Ordenamiento de un conjunto de elementos químicos mediante su número atómico, su masa atómica y ambas propiedades [Leal y Restrepo, 2019]. Adaptado de [Leal y Restrepo, 2019].

Generalizando, para definir un sistema periódico sobre los elementos químicos E es necesario definir un conjunto de propiedades A y otro conjunto P . Con A definimos una relación de orden \leq_A que puede generar un orden total o parcial, mientras que con P definimos una relación de similitud C_P . Finalmente, el sistema periódico definido es la terna (E, \leq_A, C_P) , es decir, el sistema periódico definido es un conjunto de elementos químicos ordenados mediante las propiedades que forman A y clasificados por las propiedades que forman P [Leal y Restrepo, 2019].

Una forma conveniente de representar a un sistema periódico generalizado es mediante diagramas de Hasse para mostrar el orden y mediante hipergrafos para mostrar la similitud. Por ejemplo, supongamos que deseamos armar un sistema periódico con los elementos $E = \{Hf, Zr, Ti, Ta, Nb, Cr, V, Mn, Cu, Co, Ni, Fe\}$ ordenados por su número atómico y se sabe que grupos de elementos similares son $\{Hf, Ti, Zr, Ta, Nb\}$, $\{Ti, V, Cr, Mn\}$ y $\{Mn, Cu, Co, Ni, Fe\}$. La representación del sistema periódico anterior es mostrado en la figura 23.

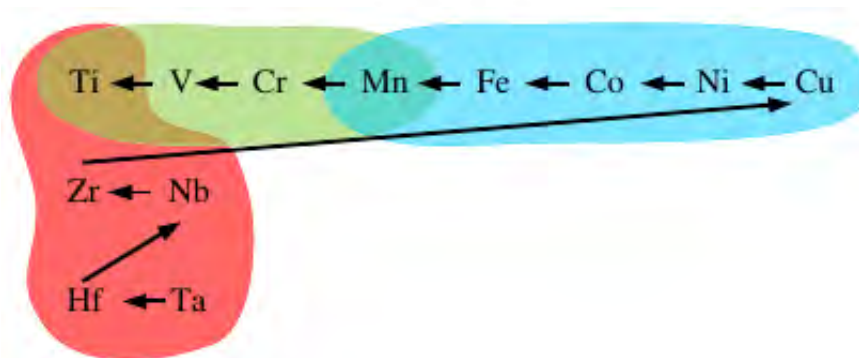


Figura 23: Ejemplo de un sistema periódico [Leal y Restrepo, 2019].

A este tipo de estructuras se les denomina hipergrafos ordenados y son propuestos para representar todo sistema periódico. Leal utiliza los 4-subárboles maximales de su dendrograma propuesto en 2012, pero además ordena a los elementos por 2 propiedades, la electronegatividad y el radio covalente, de tal manera que un elemento es anterior a otro. El objetivo de este ordenamiento es representar la polarizabilidad de los enlaces de cada átomo, de tal manera que los elementos más polarizables son aquellos que tienen una alta electronegatividad y un radio covalente pequeño [Leal y Restrepo, 2019]. La estructura del sistema periódico obtenido es el mostrado en la figura 24. Las hiperaristas están representadas por los colores en los vértices del hipergrafo ordenado.

Esta estructura tienen información quimi-topológica, pero además permite responder preguntas como, ¿entre los lantánidos y actínidos, qué grupo forma enlaces más polarizables? Para responder esto, se debe evaluar la dominancia entre un grupo y otro. La dominancia entre un grupo C_i y C_j es el número de pares ordenados del conjunto $C_i \times C_j$ en los que el elemento de C_i es posterior al elemento de C_j , dividido entre el total de pares ordenados. Como resultado, los lantánidos serían más polarizables que los actínidos [Leal y Restrepo, 2019].

Son muchos los aspectos a resaltar en este trabajo, podemos destacar que se formula una estructura del sistema periódico completa (un hipergrafo ordenado que muestra tanto un orden como una similitud entre los elementos). Al haber formulado esta estructura matemáticamente, teóricamente es posible ver si 2 sistemas periódicos son idénticos, o si uno está incluido en otro [Leal y Restrepo, 2019].

Otro aspecto es que el orden de los elementos químicos fue explorado para enriquecer la

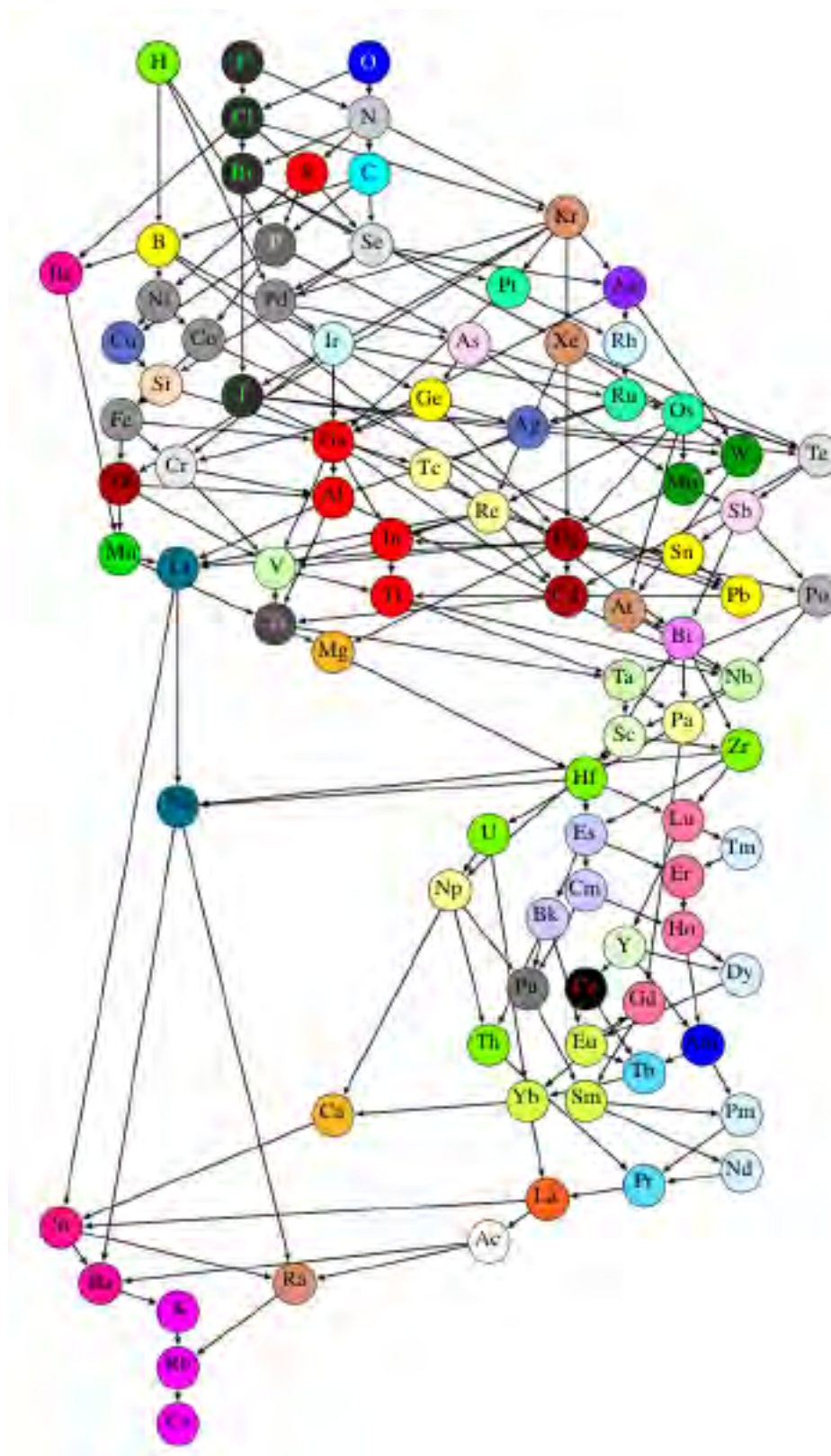


Figura 24: Estructura formal del sistema periódico [Leal y Restrepo, 2019].

visión que se tiene de los sistemas periódicos. Con esto se abre la posibilidad de plantear muchos otros ordenes entre los elementos. En base a los órdenes establecidos y a los grupos formados, es posible comparar características entre estos grupos, como cuando se planteó si los actínidos tenían enlaces más polarizables que los lantánidos.

Los hipergrafos ordenados son un concepto nuevo [Feng et al., 2018] y por mostrar tanto relaciones de orden como de similaridad son ideales para la representación del sistema periódico de los elementos químicos [Leal y Restrepo, 2019].

3.4. Reflexión sobre el avance de los estudios de similaridad

El trabajo [Karakasidis y Georgiou, 2004] es peculiar porque se logra clasificar a los elementos químicos prácticamente como los periodos de la tabla periódica. Teniendo en cuenta que las únicas propiedades que se usaron fueron el número atómico y la primera energía de ionización, este resultado realmente no es muy sorprendente. Lo más importante a resaltar en este trabajo es que la similaridad es esencialmente horizontal y que este tipo de similaridad será la favorecida si usamos propiedades relacionadas como la electronegatividad y el radio atómico [Restrepo, 2018].

En [Zhou X. Z., 2000] se usaron únicamente propiedades físicas, pero más variadas. Se observaron algunos comportamientos anómalos en su agrupamiento, algo que se resalta en el mismo trabajo de Zhou. Se usaron varias propiedades atómicas, con lo que también es apreciable una similaridad horizontal entre sus agrupamientos. No es incorrecto encontrar similaridades horizontales, pero esto es más esperable en el grupo de los metales de transición y no en los elementos del bloque p [Restrepo, 2018].

Algo muy importante es que cuando se usaron propiedades físicas como la densidad, el punto de fusión u otras propiedades físicas, no se indicó en ninguno de los trabajos la forma alotrópica sobre las que se tomaron estos valores [Restrepo, 2018]. Como ya se discutió antes, esto sin lugar a dudas es un problema metodológico, pues estas magnitudes corresponden a sustancias simples y no a sustancias básicas.

En [Chen, 2010] el resultado más importante fue la marcada diferencia en la disposición de los elementos metálicos y no metálicos. También resalta que los semimetales se encuentran en la frontera de ambos grupos. Sin embargo, cuando se trabaja con redes neuronales, la distancia entre las neuronas se pierde en el mapa final [Restrepo, 2018]. Un ejemplo de este comportamiento es que el Na y Kr se encuentran más cerca de lo que están el F y el Cl .

Por el lado del análisis jerárquico de clusters, el desarrollo de la quimi-topología en [Restrepo et al., 2004] tiene un gran valor para poder explorar las relaciones de similaridad de cualquier grupo de elementos y no solo de los clusters obtenidos. Tanto en [Restrepo et al., 2004] y [Restrepo et al., 2006] se tiene en cuenta que los resultados mediante análisis jerárquico de clusters son susceptibles al cambio de métrica o de metodología de agrupamiento. Es por eso que se trabajó con árboles consenso, para tener información más representativa. En este grupo de trabajos se observa un paulatino cambio a cada vez darle mayor importancia a las propiedades químicas. Esto llega a su máxima expresión en el trabajo de [Leal et al., 2012] donde solo se usaron propiedades químicas [Restrepo, 2018].

Este cambio hacia propiedades químicas tiene gran relevancia si es que tenemos en cuenta los conceptos de sustancias básicas y sustancias simples. Las propiedades físicas corresponden a sustancias simples; sin embargo, son las propiedades químicas las que corresponden a las sustancias básicas [Restrepo, 2018].

A lo largo de los diferentes estudios, los elementos en los extremos de la tabla (alcalinos, halógenos y gases nobles) muestran tener el comportamiento más regular. Por el contrario, los metales de transición tienen un comportamiento más difuso [Restrepo, 2018]. Esto es acorde con lo expuesto en la sección 1.5, donde se exploraron algunas de las formas de agrupar elementos metálicos.

Otro aspecto muy importante es que en todos estos estudios, excepto el del [Leal y Restrepo, 2019], no se trabajó en el orden de los elementos químicos. Esto abre una nueva dimensión a los estudios de similaridad, pues se pudo verificar que explorar el orden en los elementos puede ayudar a responder cuestiones de interés. Sin embargo, lo más importante a resaltar es que se propuso una estructura formal para los sistemas periódicos mediante los hipergrafos ordenados, pues se ajustan muy bien a mostrar orden y similaridad [Restrepo, 2019].

Volviendo a las 2 características esenciales en los sistemas periódicos, la similaridad ha sido explorada en gran medida mediante diferentes técnicas computacionales, pero el orden, por el contrario, ha sido poco explorado. En la similaridad, ha existido un cambio hacia el uso de propiedades químicas, lo cual responde a la necesidad de que los sistemas periódicos se construyan con las sustancias básicas.

En la mayoría de los estudios de similaridad, no se consideró ni a la masa atómica ni al número atómico como propiedades que definen la similaridad. Haber excluido estas propiedades muestra que no son determinantes cuando se explora la similaridad de los elementos químicos [Restrepo, 2018]. Probablemente estas propiedades sean más importantes al momento de explorar el orden de los elementos químicos.

4. Relaciones de Similaridad entre los Elementos Metálicos

4.1. Clasificaciones sistemáticas de los elementos metálicos

En la sección 1.5 de este trabajo se introdujeron de forma sencilla 2 clasificaciones de los elementos metálicos propuestas en libros de química inorgánica clásicos. De forma general, los agrupamientos de los elementos son inducidos por los grupos y periodos de la Tabla Periódica. Sin embargo, se conocen muchas relaciones de similaridad entre elementos que no pertenecen al mismo grupo o periodo. Por ejemplo, la relación diagonal, el movimiento de caballero o la similaridad entre elementos de un grupo n y el grupo $n + 10$. Por lo anterior es justificable que existan clasificaciones que no se basen únicamente en considerar elementos en un mismo grupo o periodo [Rayner-Canham, 2018].

En [Rayner-Canham, 2018] se menciona que una debilidad en las clasificaciones comentadas en la sección 1.5 es que ciertas características que son importantes para marcar la similaridad de una familia de elementos luego son ignoradas en las siguientes familias. Un ejemplo de ello es que en [Greenwood y Earnshaw, 2012] se menciona que los elementos del grupo 3 (escandio, itrio y lantano) poseen hidróxidos que son obtenidos como precipitados gelatinosos; pero para el grupo 4 (titanio, circonio y hafnio) no se considera una particularidad similar. Lo ideal sería que en base a ciertos criterios químicos se puedan definir correctamente familias de elementos; sin embargo, lo normal ha sido que las familias se definan a partir de los grupos o periodos de la Tabla Periódica y posteriormente se planteen todas las similaridades que estos elementos puedan tener en común.

Dos trabajos en los que no se cae en este error son *Metals: typical and less typical, transition and inner transition* de Habashi y *The Aqueous Chemistry of the Elements* de Schweitzer según [Rayner-Canham, 2018].

Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au

Figura 26: Clasificación de los metales de transición en [Schweitzer y Pesterfield, 2010]. Fuente [Rayner-Canham, 2018].

En [Rayner-Canham, 2018] se propone una clasificación de los metales de transición considerando el trabajo de Schweitzer y algunas características adicionales. Como resultado se consideró apropiado excluir a la plata del grupo de los metales de transición, pues esta sería más similar al talio que a otros metales de transición. Este agrupamiento es mostrado en la Figura 27.

Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Tl

Figura 27: Clasificación de los metales de transición propuesto en [Rayner-Canham, 2018].

Lo primero a destacar en esta clasificación es que el titanio y el manganeso tienen una pertenencia secundaria a otros grupos, lo cual se indica con una pequeña barra en la cabeza de la casilla del elemento coloreada según el grupo al que pertenece de forma secundaria.

Por ejemplo, el titanio además de pertenecer al grupo de los que tienen diagramas de Pourbaix dominados por especies insolubles, también pertenece al grupo de los elementos que poseen especies con alto estado de oxidación solubles. Esta última pertenencia se considera secundaria porque el TiO_2 no es una especie soluble, pero posee un estado de oxidación +4, que es el máximo estado de oxidación que podría alcanzar el titanio por su configuración electrónica, así como los estados de oxidación +5, +6 y +7 son los máximos para el vanadio, cromo y manganeso respectivamente.

El Mn tiene una pertenencia secundaria al grupo del Fe, Co y Ni porque también posee un ion sin oxígeno en solución con estado de oxidación +2, predominante en un amplio rango de pH y potencial eléctrico, aspecto que también cumple el cobre.

La resistencia a la corrosión también se puede apreciar en los diagramas de Pourbaix, pues la forma metálica del elemento abarca un amplio rango de pH y potencial eléctrico. En base

a esto es que se define el grupo de los metales nobles, pero en [Rayner-Canham, 2018] por ese mismo motivo se decide incluir al Au.

La última diferencia con el trabajo de Schweitzer es que la plata es excluida del grupo de los metales de transición por su similitud con el talio, la cual es conocida por ser un caso de los movimientos de caballero [Rayner-Canham, 2018].

Esta clasificación expuesta, no tiene el nivel de sistematización que poseen los diferentes estudios de similitud expuestos. Sin embargo, se abre la posibilidad de evaluar la similitud de los elementos químicos en base a sus diagramas de Pourbaix. Por tal motivo, es necesario considerar si una clasificación en base a los diagramas de Pourbaix violarían o no la tendencia a analizar a los elementos químicos como sustancias básicas.

La respuesta a lo anteriormente planteado es que no se violaría la tendencia a analizar a los elementos como sustancias básicas. Ya que los diagramas de Pourbaix representan información química, aunque ya no solo información propia de los elementos químicos, sino también información de sus compuestos.

5. Conclusiones

El concepto de elemento químico es ambiguo, ya que no permite distinguir entre las realizaciones físicas que tienen los elementos químicos y su concepción más abstracta (una que engloba a todas las formas en las que un elemento químico puede presentarse). Por tal motivo es necesario hacer la distinción entre sustancias simples y sustancias básicas. Las sustancias simples son las realizaciones físicas de los elementos, por ejemplo, el diamante y el grafito son sustancias simples pues corresponden a formas en las que el carbono se presenta en el mundo físico. Las sustancias básicas son la parte abstracta de cada elemento químico que está presente en todas sus realizaciones físicas y en todos sus compuestos [Restrepo, 2018].

Es muy importante resaltar que propiedades como la densidad o el punto de fusión se refieren a sustancias simples. Por ejemplo, el diamante tiene una densidad diferente a la del grafito. Por otro lado, las propiedades que caracterizan a las sustancias básicas son las químicas. Por ejemplo, tanto el diamante como el grafito pueden arder y formar CO_2 .

Se pudo explorar, en esencia, el concepto de sistema periódico. Un sistema periódico es un ordenamiento y una clasificación de los elementos químicos y para definirlo es necesario plantear entre los elementos relaciones de orden y similitud [Restrepo, 2019]. Una tabla periódica sería una representación del sistema periódico en un espacio comúnmente bidimensional [Restrepo, 2018].

Un aspecto a destacar es que muchos de los conceptos expuestos, como sustancia básica, sustancia simple, orden y similitud tienen su origen en los escritos de Mendeleev. Esto muestra lo arraigados que son a los sistemas periódicos. Por supuesto, estos conceptos también tienen valor histórico.

Se exploraron diferentes estudios que usaron diferentes técnicas computacionales para explorar la similitud entre elementos químicos. En todos estos, los elementos fueron descritos por un conjunto de propiedades y cada vez ha existido un mayor interés por la inclusión de propiedades químicas [Restrepo, 2018]. Esto llegó a su máxima expresión en el 2012 con el trabajo de [Leal et al., 2012] donde solo se analizaron propiedades químicas. Esto se debe a que la similitud entre elementos debe ser buscada a nivel de sustancias básicas, porque si se incluyesen propiedades propias de las sustancias simples no estaríamos caracterizando a un elemento de forma generalizada.

Un aporte significativo se dio en [Restrepo et al., 2004], donde se introdujo la quimiotopología, una metodología para explorar relaciones de similaridad entre elementos químicos. Destaca por su flexibilidad, pues permite explorar la similaridad sobre cualquier grupo de elementos químicos. Esta metodología luego fue reutilizada en [Restrepo et al., 2006] y [Leal et al., 2012].

En [Leal y Restrepo, 2019] se propuso que los hipergrafos ordenados son una estructura que tiene la capacidad de representar a los sistemas periódicos. Un hipergrafo ordenado es una estructura compleja, pero de forma simplificada muestra dos tipos de relaciones. La primera relación es la de orden y se representa mediante flechas y la segunda es una relación de similaridad que se representa encerrando a un grupo de objetos con características similares. Un ejemplo de hipergrafo ordenado se muestra en la Figura 23. Al mismo tiempo se abrió la posibilidad de explorar el orden de los elementos. Como nota curiosa, este artículo se publicó en el Año Internacional de la Tabla Periódica (un gran aporte en un año muy especial).

Por último, se explicó que las relaciones de similaridad entre los elementos metálicos, en su mayoría, son difusas, esto quiere decir que es difícil establecer familias entre estos elementos. También se mencionó que las clasificaciones convencionales fuerzan a que los elementos se agrupen de acuerdo a su grupo o periodo en la Tabla Periódica. Sin forzar a algún agrupamiento en particular y sin una descripción matemática de la similaridad, en [Rayner-Canham, 2018] se planteó una clasificación basada principalmente en los diagramas de Pourbaix de cada elemento (Figura 27). Dado que esta clasificación únicamente contempla información química, se postuló la posibilidad de realizar un estudio más sistemático con estos diagramas usando las herramientas computacionales expuestas.

Referencias

- [Adhikari y Adhikari, 2014] Adhikari, M. R. y Adhikari, A. (2014). *Basic modern algebra with applications*. Springer.
- [Bretto, 2013] Bretto, A. (2013). *Hypergraph theory. An introduction. Mathematical Engineering. Cham: Springer*.
- [Cardoso, 2000] Cardoso, J. L. V. (2000). Química y epistemología, una relación esquivada. *Revista colombiana de Filosofía de la Ciencia*, 1(3):9–26.
- [Castleman Jr, 2011] Castleman Jr, A. (2011). From elements to clusters: The periodic table revisited. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2(9):1062–1069.
- [Chen, 2010] Chen, D. Z. (2010). A new method for studying the periodic system based on a Kohonen neural network. *Journal of Chemical Education*, 87(4):433–434.
- [Cotton et al., 1988] Cotton, F. A., Wilkinson, G., Murillo, C. A., Bochmann, M., y Grimes, R. (1988). *Advanced inorganic chemistry*, volume 5. Wiley New York.
- [Diestel et al., 2010] Diestel, R., Schrijver, A., y Seymour, P. (2010). Graph theory. *Oberwolfach Reports*, 7(1):521–580.
- [Dougherty, 1995] Dougherty, M. (1995). A review of neural networks applied to transport. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 3(4):247–260.
- [Feng et al., 2018] Feng, F., He, X., Liu, Y., Nie, L., y Chua, T.-S. (2018). Learning on partial-order hypergraphs. In *Proceedings of the 2018 World Wide Web Conference*, pages 1523–1532.
- [Flores Turpo, 2019] Flores Turpo, A. E. (2019). La matemática del sistema periódico de los elementos. *Repositorio de Tesis PUCP*.

- [Greenwood y Earnshaw, 2012] Greenwood, N. N. y Earnshaw, A. (2012). *Chemistry of the Elements*. Elsevier.
- [Habashi, 2010] Habashi, F. (2010). Metals: typical and less typical, transition and inner transition. *Foundations of Chemistry*, 12(1):31–39.
- [Heaton, 2008] Heaton, J. (2008). *Introduction to Neural Networks for C#*. Heaton Research.
- [Karakasidis y Georgiou, 2004] Karakasidis, T. y Georgiou, D. N. (2004). Partitioning elements of the periodic table via fuzzy clustering technique. *Soft Computing*, 8(3):231–236.
- [Klir y Yuan, 1995] Klir, G. y Yuan, B. (1995). *Fuzzy sets and fuzzy logic*, volume 4. Prentice hall.
- [Leal y Restrepo, 2019] Leal, W. y Restrepo, G. (2019). Formal structure of periodic system of elements. *Proceedings of the Royal Society A*, 475(2224):20180581.
- [Leal et al., 2012] Leal, W., Restrepo, G., y Bernal, A. (2012). A network study of chemical elements: from binary compounds to chemical trends. *MATCH Commun Math Comput Chem*, 68:417–442.
- [Lee, 2008] Lee, J. D. (2008). *Concise inorganic chemistry*. John Wiley & Sons.
- [Lee, 2004] Lee, K. H. (2004). *First course on fuzzy theory and applications*, volume 27. Springer Science & Business Media.
- [Ostrovsky, 2001] Ostrovsky, V. (2001). What and how physics contributes to understanding the periodic law. *Foundations of Chemistry*, 3(2):145–181.
- [Otto, 2016] Otto, M. (2016). *Chemometrics: statistics and computer application in analytical chemistry*. John Wiley & Sons.
- [Paneth, 1962] Paneth, F. A. (1962). The epistemological status of the chemical concept of element (i). *The British Journal for the Philosophy of Science*, 13(49):1–14.
- [Rao, 2002] Rao, G. S. (2002). *Discrete Mathematical Structures*. New Age International.
- [Rayner-Canham, 2000] Rayner-Canham, G. (2000). Periodic patterns. *Journal of Chemical Education*, 77(8):1053.
- [Rayner-Canham, 2018] Rayner-Canham, G. (2018). Organizing the transition metals. *Mendelev to Oganesson: a multidisciplinary perspective on the periodic table*, pages 195–205.
- [Restrepo, 2018] Restrepo, G. (2018). The periodic system: a mathematical approach. *Mendelev to Oganesson: a multidisciplinary perspective on the periodic table*, pages 80–103.
- [Restrepo, 2019] Restrepo, G. (2019). Challenges for the periodic systems of elements: Chemical, historical and mathematical perspectives. *Chemistry—A European Journal*, 25(68):15430–15440.
- [Restrepo et al., 2006] Restrepo, G., Llanos, E. J., y Mesa, H. (2006). Topological space of the chemical elements and its properties. *Journal of mathematical chemistry*, 39(2):401–416.
- [Restrepo et al., 2004] Restrepo, G., Mesa, H., Llanos, E. J., y Villaveces, J. L. (2004). Topological study of the periodic system. *Journal of chemical information and computer sciences*, 44(1):68–75.
- [Rojas, 2013] Rojas, R. (2013). *Theorie der neuronalen Netze: eine systematische Einführung*. Springer-Verlag.

- [Scerri, 2019] Scerri, E. (2019). *The periodic table: its story and its significance*. Oxford University Press.
- [Scerri, 2009] Scerri, E. R. (2009). *Selected papers on the periodic table*. Imperial College Press.
- [Schummer, 1998] Schummer, J. (1998). The chemical core of chemistry i. *HYLE-International Journal for the Philosophy of Chemistry*, 4:129–162.
- [Schweitzer y Pesterfield, 2010] Schweitzer, G. y Pesterfield, L. (2010). *The aqueous chemistry of the elements*. Oxford University Press, New York.
- [Shaik et al., 2019] Shaik, S., Cremades, E., y Alvarez, S. (2019). The periodic-table—a universal icon: Its birth 150 years ago, and its popularization through literature art and music. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(38):13194–13206.
- [Sneath, 2000] Sneath, P. (2000). Numerical classification of the chemical elements and its relation to the periodic system. *Foundations of Chemistry*, 2(3):237–263.
- [Thulasiraman et al., 2016] Thulasiraman, K., Arumugam, S., Nishizeki, T., Brandstädt, A., et al. (2016). *Handbook of Graph Theory, Combinatorial Optimization, and Algorithms*. Taylor & Francis.
- [Wang y Schwarz, 2009] Wang, S.-G. y Schwarz, W. E. (2009). Icon of chemistry: the periodic system of chemical elements in the new century. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(19):3404–3415.
- [Winter, 2011] Winter, M. J. (2011). Diffusion cartograms for the display of periodic table data. *Journal of Chemical Education*, 88(11):1507–1510.
- [Yan, 2016] Yan, M. (2016). *Introduction to topology*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG.
- [Zadeh, 1965] Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Information and control*, 8(3):338–353.
- [Zadeh, 1971] Zadeh, L. A. (1971). Similarity relations and fuzzy orderings. *Information sciences*, 3(2):177–200.
- [Zhou X. Z., 2000] Zhou X. Z., W. Kai-Hua, C. G.-Q. F. Z. X. Z. J.-J. (2000). Fuzzy cluster analysis of chemical elements. *Computers and Applied Chemistry*, 17(2):167–168.