

MODELO DE ELEVACIÓN DE LAS PROPUESTAS

1) **Denominación de la actividad**

INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN ORIENTADA A LA QUÍMICA EN PYTHON

2) **Modalidad de la actividad.**

Modalidad híbrida:

- Teóricos y prácticos: Presencial y Virtual
- Taller y consultas: Presencial y Virtual

3) **Institución organizadora y co-organizadoras (si corresponde).**

Departamento de Química Teórica y Computacional

4) **Director/a (adjuntar currículum vitae).**

Oscar Alejandro Oviedo

Prof. Asociado DS, DQTC-FCQ

Investigador Independiente CONICET

5) **Codirectores (si corresponde, adjuntar currículum vitae)**

Prof. Ing. Juan Martín Hümöller Prof. Asistente DS DQTC-FCQ/ Becario doctoral CONICET)

Prof. Lic. Fernando Ricardo Pantano (Prof. Asistente DS FCQ/ Becario doctoral CONICET)

6) **Conformación y justificación del equipo (adjuntar currículum vitae):**

La justificación de la conformación del equipo se desprende de la cantidad de alumna/os estimada/os (la versión previa fue 60) y la fuerte demanda de actividades, algunas de las cuales se enumeran a continuación.

El curso implica tareas de coordinación, elaboración de los temarios (módulos), presentaciones para las clases teóricas, elaboración y resolución de ejercicios para las clases prácticas, realización de talleres de consultas, tareas de redacción y correcciones de evaluaciones continuas y del trabajo integrador final.

A las tareas antes mencionadas, es necesario adicionar, la necesidad de responder consultas por correo y/o canales oficiales de comunicación del curso.

7) **Objetivos, temario a desarrollar y bibliografía.**

El objetivo principal de este curso es introducir al público general en la programación aplicada a las ciencias química, física y matemática, adquiriendo habilidades básicas en programación utilizando el lenguaje Python. El enfoque del curso será del tipo práctico empleando la programación en la resolución de problemas relacionados.

Los objetivos específicos son:

- Adquirir los conceptos fundamentales de la programación en Python, incluyendo variables, tipos de datos, estructuras de control y funciones.
- Asimilar el lenguaje Python como una herramienta para la manipulación y análisis de datos químicos, físicos y matemáticos.
- Proporcionar, mediante ejemplos prácticos de aplicaciones de programación en la química, como cálculos estequiométricos, análisis de datos experimentales y teóricos.
- Introducir el empleo de bibliotecas y módulos específicos de Python que son relevantes para la química, como NumPy, SciPy y Matplotlib.
- Fomentar la resolución de problemas a través de ejercicios prácticos que involucren la implementación de algoritmos y técnicas de programación.
- Desarrollar la capacidad para diseñar y escribir sus propios programas Python para abordar problemas específicos.
- Promover la colaboración y el aprendizaje interactivo entre los participantes a través de actividades prácticas y proyectos grupales aplicando conocimientos adquiridos.

Al finalizar el curso, los participantes deberían adquirir una comprensión de los fundamentos de la programación en Python y estar preparados para utilizar estas habilidades para resolver problemas prácticos en el campo de la química, la física y las matemáticas.

La certificación será avalada por la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Nacional de Córdoba, dictada por docentes del Departamento de Química Teórica y Computacional.

El temario está organizado en 11 semanas (incluyendo 2 semanas sin clases, respetando las semanas de exámenes parciales de cuatrimestre impar de la FCQ), dictadas en 17 clases sincrónicas, con una duración de 3 horas por clase (excepto la primera clase de 2 horas). Esto totaliza un curso de 50 horas. Los contenidos de cada clase tendrán un enfoque fuertemente práctico y cada unidad temática será acompañada de introducciones teóricas y ejercicios de aplicación en la química, física y matemáticas. El formato será presencial y virtual, empleando la plataforma Colaboratory de Google como base para el desarrollo. Habrá talleres virtuales para consultas y un trabajo integrador final.

7.1. Plan de estudio

Módulo 0

- Motivación del curso y de la programación en general.
- Esquema del curso y modalidad de cursado.

Módulo 1

- Entorno de desarrollo: Google Colab y Google Drive.
- Introducción al lenguaje de programación Python.
- Variables y tipos de datos básicos.
- Asignación. Conversión de tipo dato. Palabras reservadas.
- Operaciones aritméticas básicas.
- Orden de precedencia de operaciones matemáticas.
- Listas y tuplas.
- Métodos sobre listas y tuplas.
- Ejercicios prácticos con variables y tipos de datos.

Módulo 2:

- Introducción a las librerías de python 1: Math, Numpy y Scipy.
- Proceso de importación, abreviaturas.
- Ejemplo del uso de librerías. Ejercicios.
- Arreglos unidimensionales y bidimensionales.
- Manejos de arreglos.
- Introducción a las librerías de python 2: Matplotlib y Seaborn.
- Ejemplos del uso de librerías 2. Ejercicios.
- Operadores booleanos y lógicos. Precedencia.
- Control de flujo. Condicionales simples y encadenados.
- Ejemplos de aplicaciones: cálculos simples, iteraciones y validaciones.

Módulo 3:

- Estructuras de control de python 1. Ciclos for y while.
- Iteración sobre elementos de una lista, caracteres y arreglos.
- Contadores y acumuladores.
- Estructuras de control de python 2: salidas de los ciclos break, continuo y pass.
- Operador de búsqueda.

- Listas enunciadas por comprensión.
- Ejemplos de aplicaciones.
- Introducción a la programación modular en Python 1.
- Funciones predefinidas en Python (min, max).
- Creación de funciones.
- Ejemplos de aplicaciones: cálculos de propiedades, conversión de unidades, etc.

Módulo 4:

- Introducción a la programación modular en Python 2.
- Abrir, leer, escribir y otras funciones de archivos.
- Introducción a las librerías de Python 3: Pandas, RDKit y ChemFormula.
- Uso de estructuras de datos usando Pandas.
- Integración de contenidos. Funciones Numpy.
- Introducción a la visualización de datos.
- Galerías y ejercicios empleando Pandas y Seaborn.
- Interpretación de gráficos.

Módulo 5:

- Introducción a la programación orientada a objetos.
- Clases y objetos: definición y creación.
- Atributos y métodos de clase.
- Casos de aplicación.
- Proyecto final.

Módulo 6:

- Trabajo integrador final.
- Exposición del trabajo.

7.2. Relevancia y justificación

La importancia y beneficios que este curso puede aportar a los participantes en fase temprana son:

- *Relevancia de Python en la ciencia moderna:* Python es el lenguaje de programación más utilizado en la industria y en la investigación científica, incluyendo la química, física e ingeniería. La capacidad de

utilizar Python para realizar cálculos, análisis de datos y simulaciones computacionales es esencial en el mundo actual y venidero.

- *Mejora de la capacidad de resolución de problemas:* El pensamiento sistemático mediante la programación, fomenta el desarrollo del pensamiento lógico y analítico, enriquece habilidades fundamentales para la resolución de problemas complejos. A través de la programación, los participantes aprenderán a descomponer problemas en pasos más pequeños y a utilizar algoritmos para encontrar soluciones eficientes paso por paso. Esto será profundizado ya que se tomarán ejemplos de asignaturas de ciencias.
- *Automatización de tareas repetitivas:* La programación ofrece la posibilidad de automatizar tareas repetitivas y tediosas en el laboratorio, como el procesamiento de datos experimentales, el análisis de espectros y la generación de gráficos. Python brinda herramientas para mejorar eficiencia y productividad.
- *Integración con bibliotecas y/o paquetes especializados:* Python cuenta con una amplia variedad de bibliotecas científicas y herramientas especializadas para la química, física e ingeniería como NumPy, SciPy y Pandas. Estas bibliotecas permiten realizar cálculos numéricos, manipular datos y realizar análisis estadísticos de manera eficiente. El curso les proporcionará los conocimientos necesarios para aprovechar al máximo estas herramientas.
- *Preparación para futuras carreras y oportunidades laborales:* El dominio de Python es cada vez más solicitado en la industria y en la investigación científica. Este curso permite iniciarse y obtener una ventaja competitiva en el mercado laboral, ya que contarán con habilidades técnicas y computacionales altamente demandadas.
- *Fomento de la innovación y la creatividad:* La programación abre un mundo de posibilidades para la creatividad y la innovación. Los participantes podrán desarrollar sus propias herramientas de análisis, diseñar simulaciones y explorar nuevos enfoques para resolver problemas complejos. Estimulando su espíritu emprendedor y capacidad para enfrentar nuevos desafíos de la industria, adquiriendo una perspectiva más amplia.

Teniendo en cuenta los puntos antes mencionados, y atendiendo el creciente desarrollo de la inteligencia artificial, aprendizaje automático, la ciencia de datos, desarrollo de aplicaciones móviles y computación en la nube, considero que la implementación de un curso de Python, será una inversión valiosa y que el Departamento en Química Teórica y Computacional ha adoptado como propia.

7.3. Bibliografía

- Castellanos, J., Dougnac, J., Koenig, T., Blumenberg, S., & Severance, C. (2020). Python Para Todos: Explorando la Información Con Python 3.
- Vallejo, W., Díaz-Uribe, C., & Fajardo, C. (2022). Google Colab and Virtual Simulations: Practical e-Learning Tools to Support the Teaching of Thermodynamics and to Introduce Coding to Students. ACS Omega, 7(8), 7421–7429. doi:10.1021/acsomega.2c00362
- A Creative Commons Textbook for Teaching Scientific Computing to Chemistry Students with Python and Jupyter Notebooks J. Chem. Educ. 2021, 98, 489-494 DOI: 10.1021/acs.jchemed.0c01071
- C. Hill, Python for Chemists, Cambridge University Press (2023) ISBN: 9781009102049

8) **Destinatarios de la actividad.**

Este curso está destinado al público general.

Número mínimo de inscriptos: 30

Número máximo de inscriptos: 60

9) **Fecha de realización (inicio y finalización).**

Inicio: 27 de marzo 2025

Finalización: 05 de junio 2025

Este curso podrá ser repetido anualmente con futuras cohortes.

10) **Duración total en horas y cronograma de actividades.**

50 horas presenciales y virtuales totales (teóricos-prácticos), junto a actividades de apoyo virtuales mediante talleres (no contempladas en el total de horas).

10.1. Fechas importantes

Fecha de reunión informativa virtual: 24 de febrero del 2025

Fecha inicio preinscripción: 25 de febrero del 2025

Fecha límite preinscripción (sin límite de cupo): 12 de marzo del 2024 (on-line)

Fecha de confirmación de media becas: 13 de marzo del 2025 (por email)

Fecha inicio inscripción: 14 de marzo del 2025 (mediante pago matrícula)

Fecha límite de matriculación (con cupo): 25 de marzo del 2025

Fecha de iniciación del curso: 27 de marzo del 2025

Fecha de finalización del curso: 05 de junio del 2025

10.2. Cronograma de actividades

El curso se desarrollará durante 11 semanas con clases presenciales o virtuales sincrónicas (teórico-prácticos) con dos clases semanales. Las clases de los lunes serán presenciales y en aulas de baterías D3. Las clases de los jueves serán en formato virtual sincrónico. La duración total es de 50 horas según la modalidad que resulta de la combinación de actividades presenciales y virtuales. Cada participante tendrá acceso a una PC durante el dictado de los teóricos-prácticos, hasta completar disponibilidad. El participante puede traer una notebook personal para las clases.

10.3. Días y horario de cursado

Reunión	Reunión informativa virtual
Inicio	Inicio pre-inscripción
Informe	Informe de sorteo de becas, e inicio de inscripción
Finalización	Finalización de inscripción
Semana	Semana de parciales en la FCQ
Feriados	Feriados
Clases	Clases

Marzo						
Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado	Domingo
24	25	26	27	28	1	2
Reunión informativa	Inicio preinscripció					
3	4	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	15	16
			Informe Becas	Inicio inscripció		
17	18	19	20	21	22	23
24	25	26	27	28	29	30
Feriado	Fin inscripción		Clase inaugural			
31						
Clase N°1						

Abril						
Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado	Domingo
	1	2	3	4	5	6
		Feriado	Clase N°2			
7	8	9	10	11	12	13
Clase N°3			Clase N°4			
14	15	16	17	18	19	20
Clase N°5			Clase N°6	Feriado		
21	22	23	24	25	26	27
28	29	30				

Mayo						
Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado	Domingo
			1	2	3	4
			Feriado			
5	6	7	8	9	10	11
Clase N°7			Clase N°8			
12	13	14	15	16	17	18
Clase N°9			Clase N°10			
19	20	21	22	23	24	25
Clase N°11			Clase N°12			
26	27	28	29	30	31	
Clase N°13			Clase N°14			

Junio						
Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábado	Domingo
						1
2	3	4	5	6	7	8
Clase N°15			Proyecto integrado			
9	10	11	12	13	14	15
16	17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28	29
30						

10.4. Aranceles de matriculación:

Costo curso: \$AR 200.000,0 (dos ciento mil pesos, con cero centavos)

- Descuento por estudiantes de grado de la FCQ-UNC: -20% (costo \$160.000,0)
- Solicitud de becas del 50% para estudiantes de grado de la FCQ-UNC.

10.5. Matriculación:

El pago de la matrícula se recibirá a través de transferencia bancaria, hasta el día martes 25 de marzo del 2025 a las 13hs. Los datos para la transferencia son los siguientes:

A nombre de: UNC / Facultad de Ciencias Químicas **CUIT:** 30-54667062-3

Cuenta Corriente: 21319115/79 **Banco:** Nación Argentina, sucursal 1570

CBU: 0110213220021319115795

- El comprobante de transferencia debe quedar cargado en el formulario de matriculación (obligatorio). Tenga en cuenta que existe un cupo de 70 participantes.
- La matriculación se hará efectiva una vez que se abone la tasa arancelaria de matriculación.

11) Evaluación de la actividad.

Evaluación contendrá dos componentes.

Primera componente: se evaluará mediante aprobación de proyectos de programación (por módulos del 1 al 5). Las actividades se calificarán con una escala de 0-10 aprobando las mismas con un mínimo de 6. Estas evaluaciones se realizarán durante las clases presenciales de los días lunes.

Aprobar esta componente, permitirá acceder a un **certificado de asistencia**.

Segundo componente: se evaluará mediante la aprobación del proyecto final integrador (módulo 6), la cual será clasificada con una escala de 0-10 aprobando las mismas con un mínimo de 6. Estas evaluaciones se realizarán en la última semana de clases.

La nota final, será el promedio ponderado de las notas de cada componente.

Aprobar ambos componentes, permitirá acceder a un **certificado de aprobación**.

Tribunal que firmará el acta de examen: Dr. Oscar A. Oviedo, Ing. Martín Hümöller y Lic. Fernando Pantano.

12) Actividades prácticas a desarrollar en la FCQ

Las actividades se desarrollarán en el aula D3 del complejo de baterías D, con acceso a internet y dispositivos audiovisuales.

13) Monto solicitado para la actividad, acompañado de un detalle del presupuesto de la actividad firmado por el/la responsable de la ejecución de los recursos. (director o miembro docente con cargo en la UNC).

Se adjunta documento.

14) Entidad o institución auspiciantes, responsable físico, monto o tipo de contribución.

No corresponde.

15) Aval/es de la/s Institución/es co-organizadoras.

Se adjunta aval del DQTC.

16) Cualquier otra información de interés.

No se adjunta otra información.