



UNIVERSIDAD NACIONAL DE CORDOBA
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Córdoba, 23 de febrero de 2024

Señor Decano

Facultad de Ciencias Químicas

Prof. Dr. Marcelo Mariscal

S-----/-----D

De mi mayor consideración:

Tengo el agrado de dirigirme a Ud. con el motivo de solicitar se autorice el dictado del curso de extensión **Teórico-práctico: INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN ORIENTADA A LA QUÍMICA EN PYTHON** según anexo adjunto a la presente, para ser dictado entre los meses de abril a mayo de 2024 en aulas de batería D de la Ciudad Universitaria.

Sin otro particular, saluda a Ud. cordialmente.

Prof. Dr. Oscar Alejandro Oviedo

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
- Taller y consultas: Virtual

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

Departamento de Química Teórica y Computacional

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

Prof. Dr. Oscar Alejandro Oviedo (Prof. Adjunto DSE FCQ/Investigador Independiente de CONICET)

5) **Codirector/a (si corresponde, adjuntar currículum vitae)**

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

Prof. Ing. Juan Martín Hümöller (Prof. Asistente DS FCQ/ Becario doctoral de CONICET)

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

Lic. Juan Carlos Jiménez (Prof. Asistente FCQ/ Becario doctoral de CONICET)

Dr. Juan de La Rosa (Becario posdoctoral en Brasil)

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

El objetivo principal de este curso es introducir a estudiantes iniciales de las cuatro carreras de la Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) de la UNC, así como al público general interesado, en la programación aplicada en la 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 con la química, la física y las matemáticas.

Los objetivos específicos son:

- Familiarizar a la/los estudiantes con los conceptos fundamentales de la programación en Python, incluyendo variables, tipos de datos, estructuras de control y funciones.

- Enseñar a los participantes cómo utilizar 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 a la/os estudiantes en el uso 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 la/os estudiantes a través de actividades prácticas y proyectos grupales aplicando conocimientos adquiridos.

Al finalizar el curso, la/los estudiantes deberían tener 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 5 semanas consecutivas, dictadas en 10 clases, con una duración de 2 horas por clase presencial (teóricos-prácticos). Los contenidos de cada clase tendrán un enfoque fuertemente práctico y cada tema será acompañado de introducciones teóricas y ejercicios de aplicación en la química, física y matemáticas. El formato será un mix de presencialidad y virtualidad, empleando la plataforma Colaboratory de Google como base para el desarrollo. Habrá talleres virtuales para consultas.

7.1. Plan de estudio

Módulo 1

- Motivación del curso y de la programación
- 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.

7.2. Relevancia y justificación

La importancia y beneficios que este curso puede aportar a estudiantes en fase temprana de las carreras de grado son:

- *Relevancia de Python en la química 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, la/os estudiantes 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 las 8 asignaturas del primer año de nuestra facultad, que la/os estudiantes ya han resuelto.
- *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. Al enseñar a la/os estudiantes a utilizar Python, les brinda herramientas para mejorar su 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, como NumPy, SciPy y Pandas. Estas bibliotecas permiten a la/os estudiantes 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 iniciar sobre 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 estudiantes podrán desarrollar sus propias herramientas de análisis, diseñar simulaciones y explorar nuevos enfoques para resolver problemas químicos 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 en las fases iniciales de las carreras de grado será una inversión valiosa para nuestros estudiantes y que el Departamento en Química Teórica y Computacional ha adoptado como propia.

7.3. Bibliografía

- Castiallanos, J., Dougnac, J., Koenig, T., Blumenberg, S., & Severance, C. (2020). Python Para Todos: Explorando la Información Con Python 3.
- Vallejo, W., Díaz-Urbe, 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 a toda/o estudiante universitario y/o egresados.

Número mínimo de inscriptos: 30

Número máximo de inscriptos: 60

9) Fecha de realización (inicio y finalización).

Inicio: 22 de abril 2024

Finalización: 29 de mayo 2024

Este curso podrá ser repetido anualmente con futuras cohortes de estudiantes.

10) Duración total en horas y cronograma de actividades.

20 horas presenciales totales (teóricos-prácticos), seguidas de actividades de apoyo virtuales (taller-a demanda).

10.1. Fechas importantes

Fecha límite preinscripción (sin límite de cupo): 8 de abril del 2024 ([link](#))

Fecha de confirmación de media becas: 9 de abril del 2024 (por correo).

Fecha límite de matriculación (con cupo): 12 de abril del 2024 ([link2](#))

Fecha de iniciación del curso: 22 de abril 2024

Fecha de finalización del curso: 29 de mayo 2024

10.2. Cronograma de actividades

El curso se desarrollará durante 6 semanas con clases presenciales (teórico-prácticos) y/o clases virtuales de apoyo (taller) por semana según demanda. Las clases del lunes serán en aulas D2 con hasta 45 PC. Las clases de los miércoles en aulas D3 con hasta 50 PC. La duración total es de 20 horas áulicas según la modalidad que resulta de la combinación de actividades presenciales y virtuales.

Cada estudiante tendrá acceso a una PC durante el dictado de los teóricos-prácticos, hasta completar disponibilidad.

El estudiante puede traer una notebook personal para las clases.

Día y horario de cursado:

abril - 2024					
lunes	martes	Miércoles	jueves	viernes	sábado
1	2	3	4	5	6
8 Límite preinscripción	9 Confirmación de becas	10	11	12 Límite de matriculación	13
15	16	17	18	19	20
22 Aula D2 18:00 – 20:00	23	24 Aula D3 17:00 – 19:00	25	26	27
29 Aula D2 18:00 – 20:00	30				

mayo - 2024					
lunes	martes	miércoles	jueves	viernes	sábado
		1	2	3	4
6 Aula D2 18:00 – 20:00	7	8 Aula D3 17:00 – 19:00	9	10	11
13 Aula D2 18:00 – 20:00	14	15	16	17	18
20 Aula D2 18:00 – 20:00	21	22 Aula D3 17:00 – 19:00	23	24	25
27 Aula D3 18:00 – 20:00	28	29 Aula D3 17:00 – 19:00	30	31	

10.3. Aranceles de matriculación:

- Estudiantes de la FCQ-UNC: \$40.000 (cuarenta mil pesos)
- Público general: \$ 50.000 (cincuenta mil pesos)

10.4. Matriculación:

El pago de la matrícula se recibirá a través de transferencia bancaria, hasta el día lunes 12 de abril del 2024 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

- a) El comprobante de transferencia debe quedar cargado en el formulario de matriculación (obligatorio). Tenga en cuenta que existe un cupo de 60 estudiantes.
- b) La matriculación se hará efectiva una vez que se abone la tasa arancelaria.

11) Evaluación de la actividad.

Evaluación será mediante aprobación de proyectos de programación por módulos (objetivos) y proyecto final integrador. Las actividades se calificarán con una escala de 0-10 aprobando las mismas con un mínimo de 5.

Se realizarán certificados de asistencia (con más del 80% de asistencia a clases teóricas-prácticas) y de aprobación.

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

11) Actividades prácticas a desarrollar en la FCQ

Las actividades se desarrollarán en aulas de cómputos de baterías D, aulas D2 y D3 con acceso a internet y dispositivos audiovisuales.

12) 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

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

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

Se adjunta aval del DQTC.

15) Cualquier otra información de interés.