

Contexto

UNITEFA es la Unidad de Investigación y Desarrollo en Tecnología Farmacéutica ([UNITEFA-CONICET](#)), en donde se desempeñan docentes-investigadores que llevan a cabo una gran diversidad de estudios relacionados con las Ciencias Farmacéuticas. En ese contexto, se planean y ejecutan una gran diversidad de experimentos, lo cuáles generan alta cantidad de datos que requieren manejo y procesamiento adecuado a los fines de extraer/analizar las conclusiones correspondientes.

En ese marco, la disciplina de Ciencia de Datos, constituye una herramienta muy valiosa en el nicho científico que ocupa UNITEFA. Sin embargo, la mayor parte del personal no se encuentra entrenada en técnicas avanzadas de manejo y procesamientos de datos a escala media-alta, como así tampoco respecto de la automatización de workflows para análisis de rutina. En la actualidad gran parte del personal emplea las técnicas clásicas y de baja eficiencia para atender dicho procesamiento de datos.

La idea

Un grupo de investigadores pertenecientes a UNITEFA, que por diversas circunstancias incluyen dentro de sus experticias científicas el manejo y procesamiento de datos empleando el lenguaje de programación Python, decidimos socializar en la unidad las posibilidades relacionadas a las utilización de Notebooks de Jupyter para el procesamiento de datos.

Identificada la situación general en UNITEFA, se nos ocurrió relevar 2 aspectos:

- Qué problema específico relacionado con manejo y análisis de datos en ámbito de las actividad investigación podríamos resolver de manera eficiente utilizando Notebooks de Jupyter?,
- Qué aporte a la actividad docente de grado podríamos realizar incluyendo la utilización de Notebooks de Jupyter?.

La limitaciones identificadas y el aporte del *Catalyst Project*

A los fines de poder llevar a cabo las actividades planeadas, se identificó como *principal obstáculo* la necesidad de contar con infraestructura de

cómputo para correr los Notebooks de Jupyter con las siguientes posibilidades:

- que resulte fácilmente accesible a los investigadores/alumnos mediante sus cuentas institucionales,
- la posibilidad de configurar de manera personalizada el entorno del Notebook según las necesidades específicas de análisis,
- que provea un entorno colaborativo, en donde un coordinador pueda poner a disposición de la comunidad el material a utilizar,
- que existe persistencia de los archivos generados durante el trabajo,
- contar con la posibilidad de correr los Notebooks de Jupyter desde cualquier computadora conectada a internet y de manera independiente al sistema operativo utilizado.
- entre otros aspectos menores

En éste escenario, *Catalyst Project*, y con el apoyo y asistencia técnica de las autoridades del CCAD, configuró y puso a disposición el HUB Unitefa para todo aquel que cuente con una casilla de correo con dominio @unc.edu.ar o @mi.unc.edu.ar. Ello incluye a todos los docentes y estudiantes de la UNC, permitiendo utilizar Notebooks de Jupyter en máquinas virtuales contemplando todas la posibilidades enumeradas anteriormente.

El acceso público del Notebook se hizo desde el siguiente enlace.

1. La jornada de Ciencias de Datos en UNITEFA

Con el HUB UNITEFA configurado y andando, decidimos reunir a un grupo de investigadores para abordar un problema específico relacionado con el procesamiento de datos derivados de ensayos de disolución de fármacos, un área de trabajo muy utilizada en la Unidad. La actividad consistió en desarrollar y ejecutar un Notebook de Jupyter previamente preparado por los docentes, para ejecutar de manera automatizada y sencilla ajuste de los datos de cinética de liberación de fármacos en base a distintas condiciones de trabajo y modelos matemáticos lineales y no lineales.

El link a la difusión de la actividad se encuentra [acá](#).

El evento tuvo muy buena recepción de los participantes, todos ellos docentes investigadores de UNITEFA. Además de correr y analizar el Notebook

con la solución específica que habíamos preparado, también pudimos avanzar sobre algunos lineamientos generales de la importancia de adquirir destrezas en el campo de la ciencia de datos, así como también conceptos básicos de programación en Python.

El evento también significó una oportunidad para discutir otros casos de estudio en UNITEFA que pueden ser eficientemente resueltos el HUB UNITEFA y el modo de trabajo colaborativo planteado.

2. Proyección

Además de una segunda jornada de trabajo dentro de UNITEFA, se plantea como una proyección aplicar distintas soluciones de manejo de datos a casos problema asociados a las actividades de docencia de grado en la carrera de Farmacia, FCQ-UNC.