

ChemReactionHelper

Проект представляет собой помощника при написании химических реакций, в двух режимах:

- Complition: закончить реакцию основываясь на введенных пользователем реагентах
- Coefficients: расстановка коэффициентов реакции

Структура

- ❖ `app/` — Сервис на FastAPI.
 - `api.py` — Определение эндпоинтов.
 - `Dockerfile` — инструкция для записи образа Api
 - `main.py` — Основной файл приложения.
 - `models.py` — Модели данных.
 - `llm_model_predict.py` — Логика предсказаний и обработки данных.
 - requirements.txt — зависимости
- ❖ `streamlit_app/` — Приложение на Streamlit.
 - `app.py` — Основной файл стримлит-приложения.
 - `Dockerfile` — инструкция для записи образа streamlit
 - requirements.txt — зависимости
- ❖ `docker-compose.yml` — Файл для сборки и запуска многоконтейнерного приложения.

API содержит один эндпоинт:

- POST /predict

Пример запроса:

```
```json
{
 "task": "complition",
 "reagents": "H2 + O2"
}```
```

Пример ответа:

```
```json
{
    "model_output": "H2O",
    "status": "ok"
}```
```

Streamlit приложение

1. Введите реагенты и продукты.
2. Выберите задачи: "Закончить реакцию" и/или "Расставить коэффициенты".
3. Нажмите "Submit" и посмотрите результаты.