

Teste de Seleção: Serviço Flask para Desenho Molecular

Existem inúmeras maneiras de representar moléculas. Uma destas formas consiste em empregar uma série de regras para escrever, literalmente, a fórmula molecular por extenso, preservando, inclusive as ligações e ordem entre os átomos. Este sistema é chamado de *Simplified molecular-input line-entry system* (SMILES). Apesar de parecer complicado, fique tranquilo que você não terá trabalho algum com isso neste teste.

A primeira coisa que você precisará fazer é instalar um framework específico de química computacional, chamado **rdkit**. Ele está disponível via **anaconda** e, como sugerido em <https://anaconda.org/rdkit/rdkit>, você poderá instalar com o comando executado no Anaconda Prompt, ou terminal do Linux:

```
conda install -c rdkit rdkit
```

Agora precisamos que você crie um serviço em **Flask** bem simples, para rodar localmente. Este serviço conterá uma única rota, chamada **drawMolecule** e receberá uma única entrada, uma string válida contendo o **SMILES** de uma determinada molécula. Para ler essa string, interpretá-la e depois criar um desenho desta, com o framework, você precisará importar os seguintes módulos:

```
from rdkit import Chem
```

```
from rdkit.Chem import Draw
```

Para ler a molécula você precisará da função **Chem.MolFromSmiles** e para obter uma imagem **Pillow** desta, você usará a função **Draw.MolToImage**.

Você provavelmente precisará converter esta imagem para um formato em **base64** para depois conseguir inseri-la em uma template de **HTML**. Esta template não precisa ter nada além da imagem. Desta forma podemos obter o seguinte resultado para a molécula "CCOCCNSC=O":



Ao fim, precisamos que você nos envie, no prazo de 72 horas, todo o diretório contendo o código **.py** e a template em **HTML**, preferencialmente através de um link no **github** para também analisarmos o passo a passo do desenvolvimento do aplicativo. Caso não tenha utilizado qualquer ferramenta de controle de versões, nos envie o diretório compactado em **.zip**.

Existem alguns pontos que precisamos esclarecer:

- É imprescindível que o programa esteja funcionando para as seguintes moléculas:
 - CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C
 - O=C(C)Oc1cccc1C(=O)O
 - CC(=O)Nc1ccc(O)cc1
- O código deve ser feito usando a versão 3.6 do Python;

Aguardamos a sua resposta,

Boa sorte!