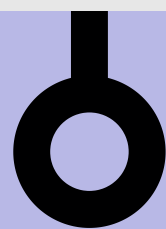
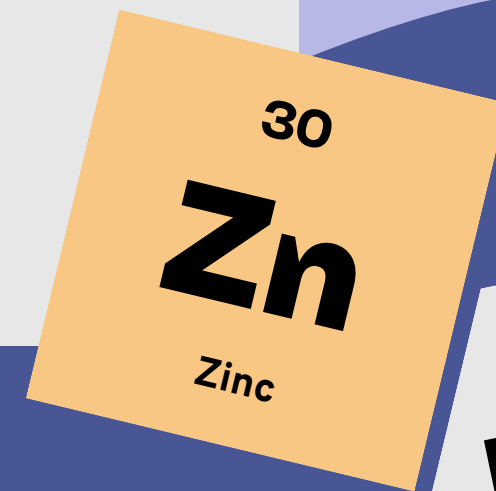
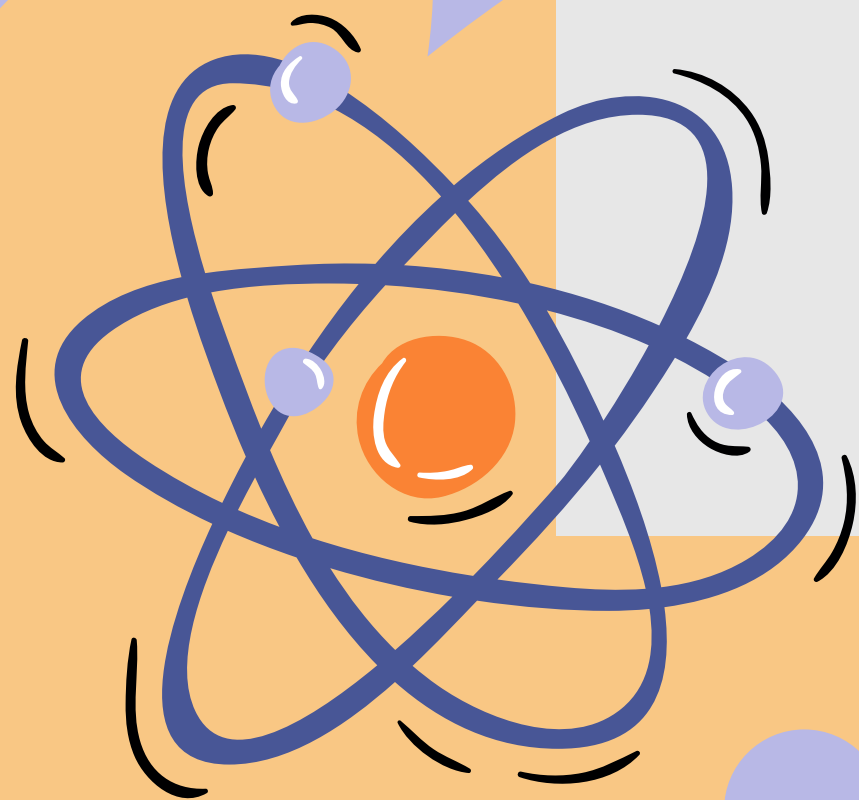




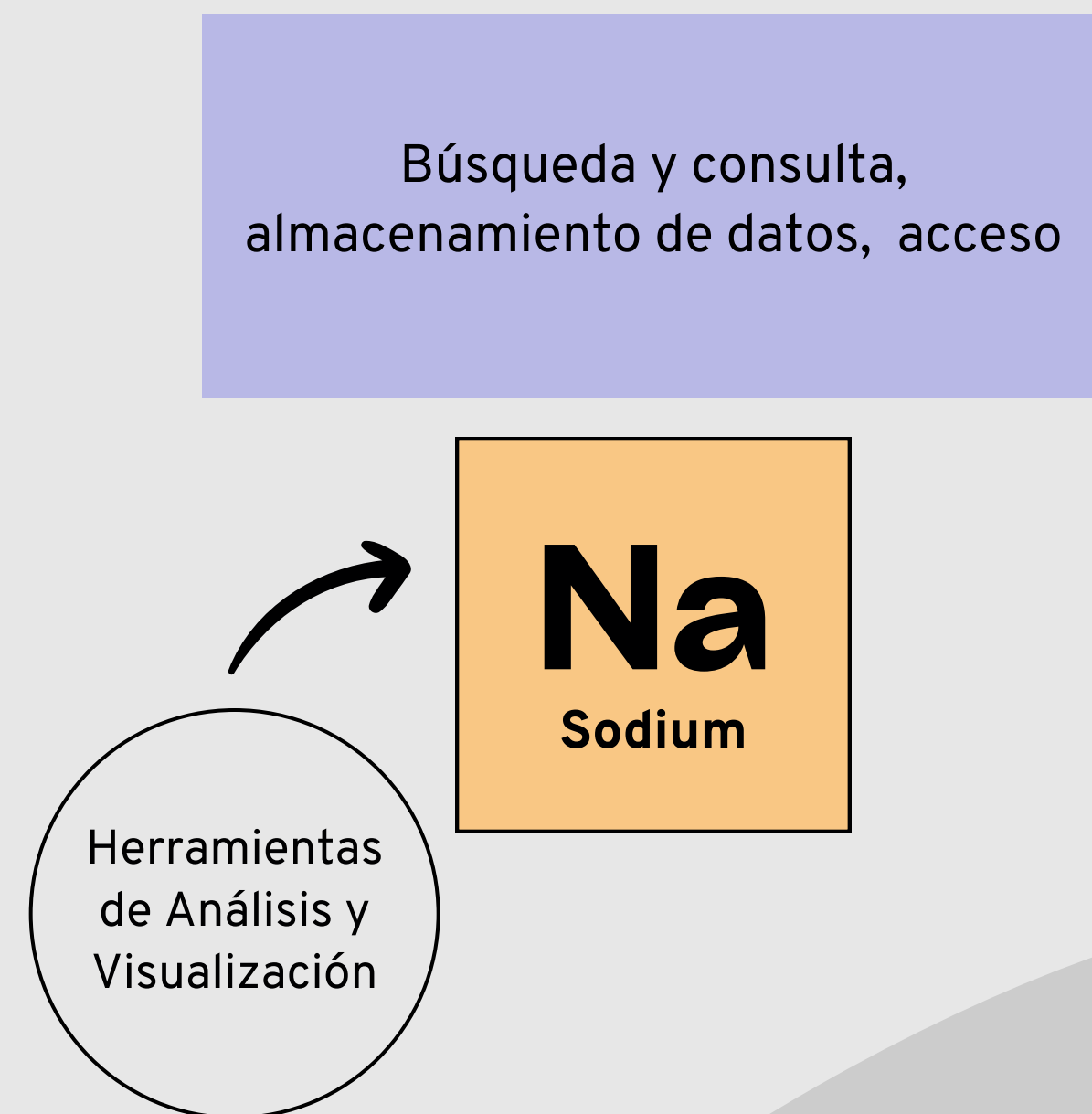
PUBCHEM Search

Una herramienta para consultar y analizar información sobre compuestos químicos utilizando la API de PubChem.



¿Qué es PubChem?

PubChem es una base de datos química mantenida por el National Center for Biotechnology Information (NCBI), que a su vez es parte de los National Institutes of Health (NIH) en los Estados Unidos. Es una de las mayores fuentes de información sobre sustancias químicas disponibles en línea de forma gratuita.



Sobre el script

1

- realizar consultas web
- acceder a registros de compuestos

2

- visualizar estadísticas

3

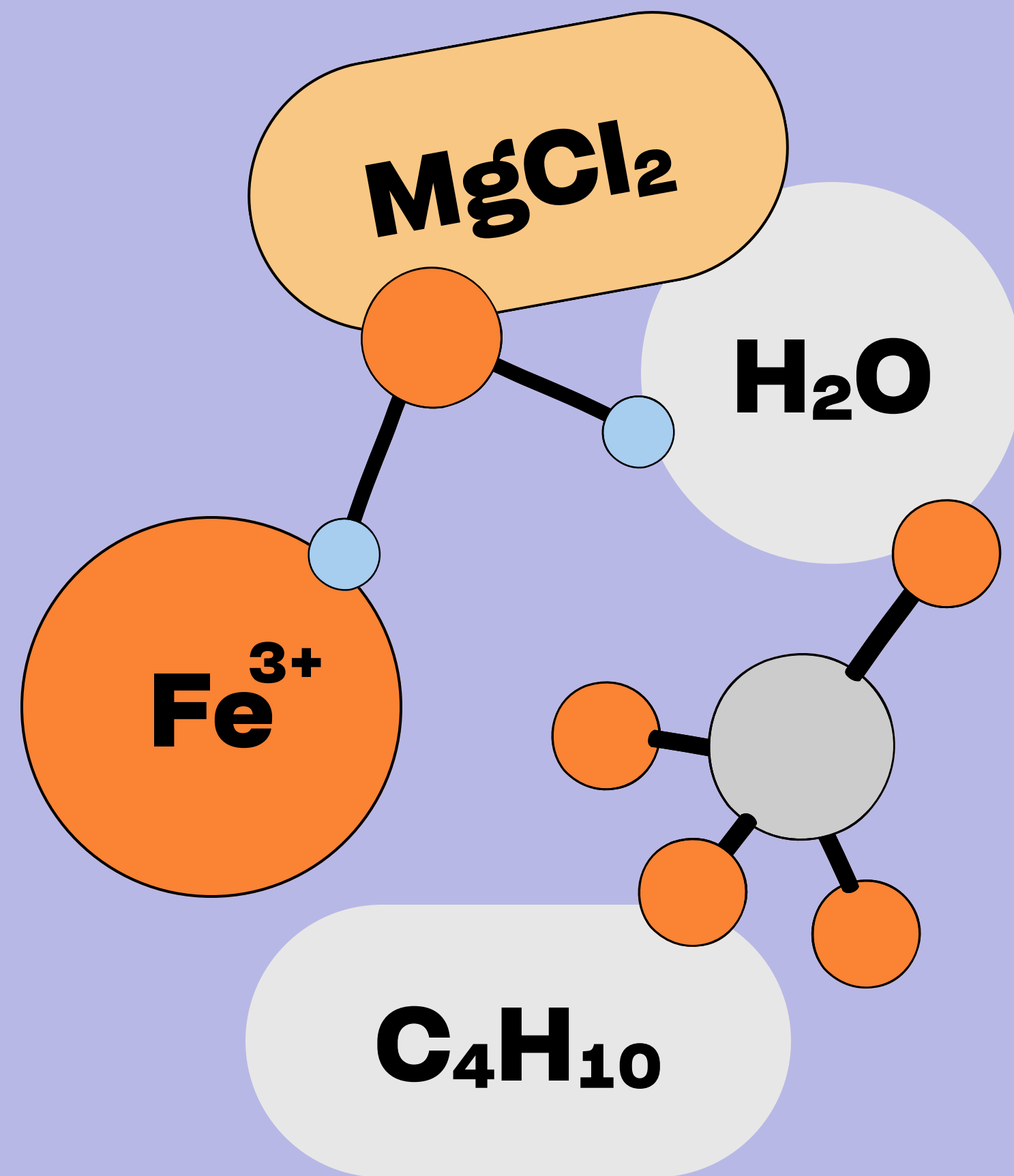
- generar gráficos sobre los datos obtenidos.

Nuestro proyecto aprovecha la API de PubChem para realizar consultas y análisis de información relacionada con compuestos químicos (propiedades, estructuras, identificadores únicos y más).



Módulo de consulta

- Interactúa con la API para realizar las requests
- Si la consulta es exitosa -solicitando el nombre del compuesto-, devuelve el CID (Chemical Identifier) del compuesto consultado. Si no, maneja el error e imprime un mensaje adecuado.
- Construye la URL de consulta utilizando el CID y realiza una solicitud HTTP a la API de PubChem.
- Si la solicitud es exitosa (código de estado 200), devuelve los datos del compuesto en formato JSON para crear un txt por compuesto solicitado. Si existe un error, maneja el error e imprime un mensaje.



Módulo de estadísticas

- Procesa los datos de los compuestos consultados y los organiza en una estructura de datos adecuada para su posterior análisis.
- Calcula estadísticas como el promedio, la desviación estándar, los valores mínimo y máximo, y los percentiles para cada una de las variables de interés (masa molecular, LogP, protones que acepta, protones que cede, enlaces que rotan).



Módulo de gráficas



- Genera gráficos estadísticos basados en los datos proporcionados. El usuario puede elegir entre tres tipos de gráficos: de barras, de líneas o de dispersión. Estos gráficos muestran estadísticas como cantidad de datos, promedio, desviación estándar, valores mínimo y máximo, así como los cuartiles 1, 2 y 3.
- Se extraen las estadísticas relacionadas con la variable seleccionada. Dependiendo del tipo de gráfico elegido, se utilizan diferentes métodos de visualización: barras, líneas o puntos (para dispersión)
- Se muestra el gráfico generado utilizando la librería matplotlib. Esto permite una visualización clara y rápida de las estadísticas de la variable seleccionada.