

18/06/2018

Química computacional fácilmente reproducible gracias a ESIgen



ESIgen es una aplicación web que permite generar resúmenes de cálculos en química computacional de forma totalmente automática. A través de sus múltiples plantillas se pueden conseguir documentos de apoyo a la publicación científica (Supporting Information) o informes técnicos adecuados para comunicaciones internas durante el proceso de investigación.

La aplicación puede probarse gratuitamente en <http://esi.insilichem.com>.

El progreso científico está íntimamente vinculado a la comprobación constante de los resultados. Sin la validación de otros miembros de la comunidad, cualquier avance o logro puede quedar en nada. Para ello, cualquier comunicación científica ha de ir acompañada de datos que permitan reproducir los experimentos realizados.

Sin embargo, un texto repleto de detalles técnicos puede convertirse en un documento pesado de leer y seguir. Por ello, la mayoría de datos necesarios para la validación de los experimentos suelen recogerse en un documento complementario denominado "Información de apoyo" o, como se le conoce más comúnmente en inglés, "Supporting Information".

Aun entre los investigadores más cuidadosos, recopilar todos estos datos es un trabajo tedioso que puede acabar consumiendo muchas horas. En química computacional, implica recorrer

decenas de archivos en busca de los valores adecuados para después copiarlos y pegarlos en otro documento. Es un trabajo necesario, pero dolorosamente ineficaz. Afortunadamente, toda esa labor se reduce a una serie de acciones repetitivas fácilmente automatizables con ayuda de programación.

ESigen es una utilidad concebida para aliviar todo este proceso. El usuario sólo necesita cargar los ficheros pertinentes en la interfaz web y el servidor se encargará de extraer y presentar la información relevante de forma totalmente automática. Finalmente, el usuario puede elegir entre exportar toda la información generada a servicios de almacenamiento de datos científicos, como [FigShare](#) o [Zenodo](#), o descargar los datos que le interesen a su PC. Se ha puesto especial énfasis en proporcionar formatos fácilmente incorporables a la investigación, aunque también es posible obtener documentos PDF listos para imprimir.

Para usuarios avanzados, ESigen permite procesar archivos en lote a través de su interfaz de línea de comandos o mediante scripts en Python. Todo el código es gratuito y está disponible en [GitHub](#).

Jaime Rodríguez-Guerra

Departamento de Química

Área de Química Física

Universidad Autónoma de Barcelona

jaime.rodriguezguerra@uab.cat

Referencias

Jaime Rodríguez Guerra Pedregal, Pablo Gómez-Orellana, Jean Didier Maréchal. **ESigen: Electronic Supporting Information Generator for Computational Chemistry Publications.** *J. Chem. Inf. Model.*, 2018, 58 (3), pp 561–564

La aplicación puede probarse gratuitamente en <http://esi.insilichem.com>

[View low-bandwidth version](#)