



XXVI ENCONTRO DE JOVENS PESQUISADORES  
VIII MOSTRA ACADÊMICA DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIA

**16 A 18 DE OUTUBRO DE 2018**

Cidade Universitária - Caxias do Sul



## **CRIAÇÃO DE UM CONTÊINER DE APLICAÇÕES CIENTÍFICAS**

Anderson Minozzo Begossi (PIBIC-CNPq), André Luis Martinotto , Claudio Antonio Perottoni (Orientador(a))

Aplicações computacionais são frequentemente usadas em simulações e cálculos nos mais diferentes âmbitos científicos. Porém, a grande maioria dessas aplicações demanda um conhecimento prévio por parte do usuário para a instalação e configuração da ferramenta em seu ambiente de trabalho, uma tarefa que consome tempo e impõe dificuldades. Podemos citar, como exemplo, a suíte de simulação computacional de materiais Quantum Espresso (<https://www.quantum-espresso.org>). A ferramenta tem uma ampla utilização em pesquisas, porém não é de fácil instalação e configuração. Em virtude desse problema, o objetivo deste trabalho foi realizar a implementação de um ambiente virtualizado, conhecido como contêiner, que tenha instalado o software Quantum Espresso, a linguagem de programação Python (<https://www.python.org>) e o gerenciador de pacotes Anaconda (<https://www.anaconda.com>). Este último permite a importação de pacotes científicos (como o SciPY e o NumPy) no ambiente virtualizado. Para a construção do contêiner foi utilizada a ferramenta de virtualização Singularity (<https://singularity.lbl.gov>). Por meio desta, qualquer ambiente virtualizado pode ser criado e utilizado de uma maneira fácil. O contêiner criado foi disponibilizado à comunidade em um repositório no GitHub (<https://github.com/abegossi/QuantumEspressoToolkit>), permitindo que interessados em usar essas ferramentas tenham maior facilidade na iniciação em seu trabalho de pesquisa, sem a necessidade de se preocupar com a instalação e configuração do ambiente de trabalho.

Palavras-chave: Quantum Espresso, Contêiner, Singularity

Apoio: UCS, CNPq