

CRIAÇÃO DE UM CONTÊINER DE APLICAÇÕES CIENTÍFICAS

Anderson M. Begossi (PIBIC/CNPq), André Luis Martinotto (Co-orientador), Cláudio Antônio Perottoni (Orientador).

INTRODUÇÃO

A suíte de simulação computacional de materiais Quantum Espresso [1] é uma ferramenta de ampla utilização em pesquisas, porém não é de fácil instalação e configuração.

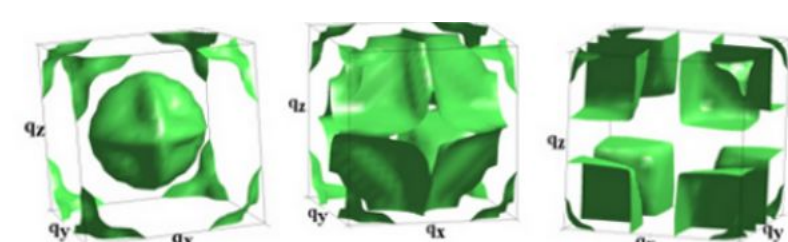
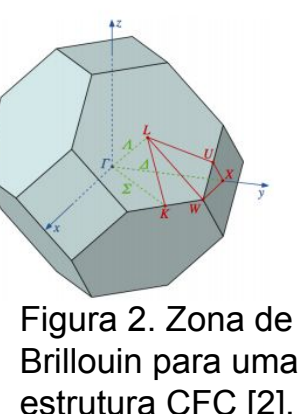
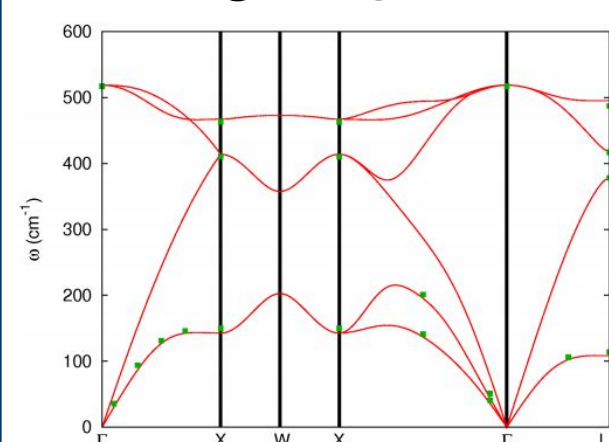


Figura 1. Espectro de dispersão de fônons do Si obtido com o Quantum Espresso [2].

Figura 2. Zona de Brillouin para uma estrutura CFC [2].

Figura 3. Representação dos fônons do SrTiO₃ sob tensão, isosuperfície de frequência zero [3].

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 [4] e o gerenciador de pacotes Anaconda [5].

METODOLOGIA

Instalação da ferramenta Singularity [6] no sistema operacional host.



Elaboração de um arquivo de receita que será usado para a construção do contêiner.

Criação do contêiner a partir da receita.



Execução do contêiner.

Disponibilização do contêiner em um repositório no GitHub para o acesso da comunidade.



RESULTADOS E DISCUSSÃO

O uso do contêiner para utilização das ferramentas Quantum Espresso, Python e Anaconda constitui uma alternativa ágil e de grande praticidade. Um usuário normal, sem conhecimentos prévios de instalação, não precisará realizar a configuração das ferramentas manualmente, uma vez que possui a receita para construir o contêiner em qualquer plataforma.

Quantidade de comandos necessários para executar o contêiner:

- 6 comandos para a instalação do Singularity;
- 1 comando para a criação e execução do contêiner.

Quantidade de comandos necessários para uso das ferramentas sem o contêiner:

- 7 comandos para a instalação do Quantum Espresso;
- Configuração de 5 diretórios nas variáveis de ambiente;
- 3 comandos para a instalação do Anaconda.

A quantidade de comandos descrita foi extraída a partir de testes realizados em um sistema operacional Linux. O usuário interessado em utilizar o contêiner necessitará fazer o download do arquivo da receita com tamanho de 1.7 kB. No decorrer do processo de criação do contêiner, a ferramenta Singularity irá se encarregar de fazer o download e a configuração descrita no arquivo. O tempo de instalação irá variar de acordo com a qualidade da conexão de internet do usuário.

O arquivo de receita necessário para a construção do contêiner, assim como um pequeno tutorial de instalação, estão disponíveis para download no endereço <https://github.com/abegossi/QuantumEspressoToolkit>.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O contêiner criado foi disponibilizado à comunidade permitindo que interessados em usar essas ferramentas tenham maior facilidade na iniciação em seu trabalho de pesquisa, sem a necessidade de se preocupar com tarefas que consomem tempo e impõe dificuldades na instalação e configuração do ambiente de trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] Giannozzi, P. et al. J. Phys.:Condens.Matter 29, 465901 (2017).
- [2] Bonini, N. Density Functional Perturbation Theory and Phonons Calculations. Disponível em: <<https://goo.gl/GecBWN>>. Acesso em 08 ago. 2018.
- [3] Birol, T. Representação dos fônons do SrTiO₃ sob tensão, isosuperfície de frequência zero. Disponível em: <<https://www.quantum-espresso.org>>. Acesso em 14 ago. 2018.
- [4] Python Software Foundation. Python Language Reference. Vers. 3.7.0. Disponível em: <<http://www.python.org>>. Acesso em 11 jul. 2018.
- [5] Anaconda Software Distribution. Computer software. Vers. 2-2.4.0. Disponível em: <<https://anaconda.com>>. Acesso em 11 jul. 2018.
- [6] Kurtzer, GM.; Sochat, V.; Bauer M, W. Singularity: Scientific containers for mobility of compute. PLoS ONE (2017). Disponível em: <<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0177459>>. Acesso em 11 jul. 2018.

AGRADECIMENTOS