

Camila Machado de Araújo

# **Projeto de Interação com o Usuário para o pacote Quantum ESPRESSO**

Campina Grande, Paraíba

Dezembro de 2020

Camila Machado de Araújo

## **Projeto de Interação com o Usuário para o pacote Quantum ESPRESSO**

Trabalho de Conclusão de Curso submetido à Coordenação de Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Campina Grande, Campus Campina Grande, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Bacharela em Ciências no Domínio da Engenharia Elétrica.

Universidade Federal de Campina Grande – UFCG

Centro de Engenharia Elétrica e Informática – CEEI

Departamento de Engenharia Elétrica – DEE

Orientador: Saulo Oliveira Dornellas Luiz, D. Sc.

Campina Grande, Paraíba

Dezembro de 2020

Camila Machado de Araújo

## **Projeto de Interação com o Usuário para o pacote Quantum ESPRESSO**

Trabalho de Conclusão de Curso submetido à Coordenação de Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Campina Grande, Campus Campina Grande, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Bacharela em Ciências no Domínio da Engenharia Elétrica.

Trabalho aprovado. Campina Grande, Paraíba, 14 de dezembro de 2020:

---

**Saulo Oliveira Dornellas Luiz, D. Sc.**  
Orientador

---

**Danilo Freire de Souza Santos, D. Sc.**  
Convidado

Campina Grande, Paraíba  
Dezembro de 2020

*A Maria Rita Rodrigues Amorim (in memoriam) e  
a Lucinda Batista Marques (in memoriam).*

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Adriane Machado de Araújo e Robson Sérgio Batista de Araújo, e ao meu irmão, Rodrigo Assis Machado de Araújo, aos quais eu devo tudo o que sou como ser humano.

A todos os meus familiares pelo suporte e amor desde os primeiros dias da vida. E a todos os amigos que se tornaram família.

Agradeço ao meu melhor amigo e namorado, André Igor Nóbrega da Silva, por tanto amor e por todo o apoio incondicional. Sem você eu não teria conseguido.

Agradeço aos meus professores, pelos valiosos ensinamentos. Em especial ao meu orientador, Saulo Oliveira Dornellas Luiz, que desde o 2018 orientou-me no âmbito acadêmico, profissional e pessoal.

Agradeço ao meu supervisor, Narcizo Marques de Souza Neto, pela oportunidade de desenvolver este trabalho. Agradeço também aos colegas da linha EMA, Danusa, Joel, Leonardo, Ulisses e Lucas pelas valorosas contribuições.

Agradeço ao Programa de Educação Tutorial pelo inestimável papel na minha formação humana e profissional. Agradeço ao Professor Wamberto José Lira de Queiroz por toda a atenção como tutor e aos colegas que participaram do programa comigo e foram fonte de inspiração e amparo. Também agradeço a todos aqueles que vieram antes de nós e ergueram os alicerces desse programa.

Especialmente, a Caio Victor Aires Diniz, Ellen Ribeiro Lucena, Pedro Henrique Oliveira Toscano Ximenes e Thiago Oliveira Delmiro Neves, por enfrentarem comigo os maiores desafios e por transformarem os momentos mais desoladores nos mais jocosos; em verdade, todos os instantes que passamos juntos. A Ellen, agradeço ainda por ter me ensinado tanto sobre a amizade e a língua portuguesa e por ter sido minha grande parceira em todas as empreitadas desse curso.

Agradeço aos melhores vizinhos, Fabrícia Paola Bosman Barros e Matheus Rocha Alves, que tornaram-se amigos mais que queridos e dividiram comigo muito além dos caminhos da universidade, os caminhos da vida.

Citando a poetisa Cora Carolina, "Não sei... se a vida é curta ou longa para nós, mas sei que nada do que vivemos tem sentido, se não tocarmos o coração das pessoas". Com essas palavras, agradeço a todos os amigos que fizeram parte dessa jornada e tornaram-se parte de mim, em minhas memórias. Em especial, a Carine Mineto, Laís Souto, Arthur Dimitre, Matheus Vilarim, e tantos outros, dos quais sempre lembrarei com muito carinho.

*“perché le radici sono importanti.  
(La Grande Bellezza, 2013)*

# Resumo

A descoberta de um material supercondutor a condições ambientes poderia revolucionar todas as aplicações em eletricidade. Uma etapa crucial nessa busca são as simulações *ab initio*, que permitem obter propriedades de materiais existentes ou previstos teoricamente. No entanto, os ambientes de simulação disponíveis nessa área são extremamente difíceis de utilizar, o que atrasa as pesquisas e desencoraja seu uso por parte dos pesquisadores. Neste trabalho é descrito um projeto de interação com usuário para tornar as simulações de propriedades de materiais supercondutores mais eficiente e fácil de aprender. Também são descritos o cálculo computacional de temperatura crítica de supercondutividade, bem como o conceito, princípios e processo do Design de Interação. Realiza-se uma análise de usabilidade no contexto de pesquisa científica e, por fim, a solução proposta é avaliada segundo essa ótica.

**Palavras-chave:** Quantum ESPRESSO, Supercondutividade, Automação, Design de Interação, Temperatura Crítica de Supercondutividade.

# Abstract

The discovery of a superconductor material at ambient conditions could revolutionize all applications in electricity. A crucial step in this search is the *ab initio* simulations, which allows the study of properties of existing or theoretically predicted materials. However, the simulation environments available in this area are extremely difficult to use, which delays research and discourages its use by researchers. This work describes an interaction design to make the simulations of superconducting materials' properties more efficient and easier to learn. It's also explained the computational calculus of superconductivity critical temperature, as well as the Interaction Design concept, principles and process. A usability analysis is carried out in the context of scientific research and, finally, the proposed solution is evaluated according to this perspective.

**Keywords:** Quantum ESPRESSO, Superconductivity, Automation, Interaction Design, Critical Superconductivity Temperature.



# Lista de ilustrações

Figura 1 – Etapas de desenvolvimento do design. . . . .	18
Figura 2 – Tela inicial da interface CCP4i2. . . . .	25
Figura 3 – Tela para entrada de dados de uma tarefa na interface CCP4i2. . . . .	26
Figura 4 – Persona 1. . . . .	28
Figura 5 – Persona 2. . . . .	29
Figura 6 – Persona 3. . . . .	30
Figura 7 – Persona 4. . . . .	31
Figura 8 – Tela principal para nova simulação. . . . .	36
Figura 9 – Tela principal para continuar uma simulação interrompida. . . . .	37
Figura 10 – Tela para entrada de parâmetros. . . . .	38
Figura 11 – Tela habilitada para compressão da estrutura cristalina. . . . .	39
Figura 12 – Tela desabilitada para compressão da estrutura cristalina. . . . .	39
Figura 13 – Tela de simulação em andamento. . . . .	40
Figura 14 – Arquivos de saída de uma simulação de fônons. . . . .	40

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Princípios de usabilidade para softwares destinados a pesquisa científica.	27
Tabela 2 – Avaliação do sistema proposto em relação aos princípios de usabilidade para softwares destinados a pesquisa científica. . . . .	41

# Lista de abreviaturas e siglas

CCP4	<i>Collaborative Computational Project, Number 4</i>
CNPEM	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
EMA	<i>Extreme condition x-ray Methods of Analysis</i>
LNLS	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron
QE	Quantum ESPRESSO
$T_c$	Temperatura crítica de supercondutividade

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>1.1</b>	<b>Motivação</b>	<b>13</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>13</b>
<b>1.3</b>	<b>Estrutura do relatório</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>15</b>
<b>2.1</b>	<b>Design de interação</b>	<b>15</b>
2.1.1	Princípios gerais de usabilidade	16
2.1.2	Processo de design de interação	17
<b>2.2</b>	<b>Cálculo da temperatura crítica de supercondutividade</b>	<b>17</b>
2.2.1	Solução computacional de um sistema quântico	19
2.2.2	Teoria da supercondutividade	20
2.2.3	Cálculo de $T_c$ por meio do pacote Quantum ESPRESSO	20
2.2.4	Software ACESC	22
<b>3</b>	<b>PROCESSO DE DEFINIÇÃO DE REQUISITOS</b>	<b>23</b>
<b>3.1</b>	<b>Análise de softwares para pesquisa científica</b>	<b>23</b>
3.1.1	Projeto CCP4i2	24
<b>3.2</b>	<b>Entrevistas com pesquisadores</b>	<b>26</b>
3.2.1	Análise das informações coletadas	27
<b>3.3</b>	<b>Definição dos objetivos de design e requisitos</b>	<b>32</b>
<b>4</b>	<b>SOLUÇÃO PROPOSTA</b>	<b>35</b>
<b>4.1</b>	<b>Descrição da interface gráfica</b>	<b>35</b>
<b>4.2</b>	<b>Descrição dos arquivos de saída</b>	<b>37</b>
<b>4.3</b>	<b>Avaliação dos requisitos e princípios de usabilidade</b>	<b>38</b>
<b>5</b>	<b>DISCUSSÃO</b>	<b>42</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>43</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>44</b>

# 1 Introdução

O poder computacional das máquinas se tornou uma ferramenta majoritariamente presente em quase todas as áreas da vida cotidiana. Uma afirmação inclusive trivial nos dias atuais. Ainda mais corriqueiro seria ressaltar que as pessoas não precisam ter nenhum conhecimento de programação para utilizar ferramentas tão poderosas. Mas o grande alvo desta discussão, o que permite as pessoas mais leigas acessar o que há de mais avançado em poder computacional, é o principal objeto deste trabalho. A interface humano-máquina.

Se na vida cotidiana o poder computacional se tornou tão importante, nas pesquisas e novas descobertas científicas ele é completamente imprescindível. Os pesquisadores que se dedicam às ciências puras também não necessariamente possuem familiaridade com programação; no entanto, nesse campo, as ferramentas com interface humano-máquina de qualidade costumam ser escassas. Isso ocorre principalmente em áreas cujas comunidades de pesquisa são pequenas. Muitos pesquisadores desistem de usar essas ferramentas devido à falta de prática com ambientes de programação em linha de comando, a grande complexidade das variáveis e documentação não acessível.

Um exemplo desse cenário ocorre nas pesquisas em supercondutividade, área de aplicação deste trabalho. O grande objetivo dos pesquisadores nesse campo é a possível descoberta de um material supercondutor em condições ambientes, o que revolucionaria todas as aplicações com eletricidade. Nessa área o cálculo teórico da temperatura crítica de supercondutividade ( $T_c$ ) é essencial para a previsão de supercondutores. Na prática, diversos novos materiais com alto  $T_c$  foram descobertos primeiro por simulações, como o  $H_3S$  (DROZDOV et al., 2015) e o  $LaH_{10}$  (GEBALLE et al., 2018), (LIU et al., 2017), (SOMAYAZULU et al., 2019).

Uma das principais ferramentas computacionais disponíveis nessa área é o pacote Quantum ESPRESSO <sup>1</sup> (QE), um conjunto integrado de código aberto para cálculos de estrutura eletrônica. No entanto, o pacote não possui interface gráfica e seu uso é muito complexo, envolvendo diversos arquivos de entrada distintos. Diante do cenário exposto, este trabalho apresenta um projeto para melhorar a experiência do usuário com o QE, fornecendo ganhos substanciais para os pesquisadores em tempo de preparação das simulações e usabilidade, além de aumentar a acessibilidade ao pacote.

---

<sup>1</sup> <<https://www.quantum-espresso.org/>>

## 1.1 Motivação

O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), localizado no Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), em Campinas - SP, é responsável pelo Sirius, uma das primeiras fontes de luz síncrotron de quarta geração do mundo. Essa infraestrutura permite a realização de diversas pesquisas de vanguarda sobre a estrutura microscópica da matéria. Uma dessas pesquisas é o projeto "Um olhar com raios X em supercondutividade".

Uma das linhas de pesquisa do projeto é a previsão de novos materiais supercondutores. Para executar essa tarefa, faz-se necessário simular o  $T_c$  de diversos compostos. No entanto, o tempo demandado para aprender a utilizar o pacote QE foi muito longo. Mesmo dominando esta ferramenta, a demora para preparar as simulações e obter resultados consistentes representava uma grande limitação para a pesquisa. Também não se tem conhecimento de nenhuma outra ferramenta mais acessível com interface gráfica para o cálculo de  $T_c$ .

Durante estágio no LNLS, a concluinte automatizou via software as simulações de  $T_c$  de interesse do grupo de pesquisa em supercondutividade. No entanto, o programa continua sendo acessado via linha de comando no terminal. Este trabalho é complemento importante para o software desenvolvido previamente, permitindo ampla acessibilidade dos pesquisadores a um ambiente de simulação intuitivo e prático.

## 1.2 Objetivos

Esse trabalho propõe-se a projetar um ambiente de interação humano-máquina que auxilie as pesquisas na área de supercondutividade. Mais especificamente, no cálculo da temperatura crítica de supercondutividade por meio do pacote QE. Este projeto possui os seguintes objetivos específicos:

- Apresentar os princípios de Design de Interação;
- apresentar o funcionamento do pacote QE para a simulação de propriedades de materiais supercondutores;
- estudar sobre ferramentas de interação humano-computador no meio científico;
- projetar um ambiente de simulações automatizado e intuitivo para os pesquisadores da área de supercondutividade.

## 1.3 Estrutura do relatório

Este documento está dividido em 6 capítulos. O primeiro dedicado à introdução e apresentação dos objetivos e motivação do trabalho. No segundo capítulo é apresentada a fundamentação teórica, que consiste nos princípios do design de interação e na descrição do cálculo de  $T_c$  com o pacote QE. Segue-se, no terceiro capítulo, as etapas do processo de definição de requisitos de projeto. No quarto capítulo é apresentada a solução de design de interação. No quinto capítulo, uma discussão sobre o trabalho desenvolvido e, por fim, o sexto capítulo apresenta a conclusão.

## 2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo serão descritos os princípios e processos do design de interação, assim como os conceitos da física quântica envolvidos no cálculo de  $T_c$ .

### 2.1 Design de interação

A difusão dos computadores para todas as áreas da vida humana criou a necessidade de interfaces que permitissem sua utilização por qualquer pessoa. O design de interação se desenvolveu a partir dessa necessidade e hoje é uma área extremamente interdisciplinar. Seu principal objetivo é compreender o usuário e desenvolver produtos interativos usáveis para um grupo alvo.

O conceito de usável pode ser exemplificado como de fácil aprendizagem, efetivo para a execução do seu propósito e de uso agradável, do ponto de vista da experiência do usuário. Esses elementos estão intimamente relacionados ao grupo de pessoas a que o produto é destinado e ao contexto em que será usado. Desse modo, o usuário torna-se o elemento central do projeto. Essa abordagem também é conhecida como *Design Thinking* e baseia-se no estabelecimento de empatia com os usuários. O processo de empatia envolve conversar com as pessoas e se inserir no contexto do problema para compreender suas necessidades. Colocando-se sob a perspectiva do usuário é possível definir melhor o problema a ser resolvido.

O processo de design centrado no usuário explora no quê as pessoas têm habilidades e no quê não têm; o que poderia ajudá-las a melhorar o desempenho das tarefas atuais; o que poderia proporcionar experiências agradáveis; o que as pessoas querem e, principalmente, métodos de “teste e experiência”. Assim é possível identificar as necessidades dos usuários e projetar sistemas para atendê-las de forma agradável. Nesse processo, as necessidades das pessoas são transformadas em requisitos de projeto.

As preocupações inerentes ao design centrado no usuário podem ser agrupadas em dois principais campos: a usabilidade e a experiência do usuário. O primeiro deles está relacionado à capacidade do sistema de realizar tarefas de forma eficaz e simples; o segundo está relacionado a como o usuário se sente ao interagir com o sistema. O design de interação é fundamental para sistemas computacionais projetados para pessoas. Pode-se definir a sub-área de Interação Humano-Computador como o campo de estudo preocupado com o projeto, avaliação e implementação de sistemas de computador interativos para pessoas e o estudos dos principais fenômenos envolvidos nesse processo.



### 2.1.1 Princípios gerais de usabilidade

Os princípios de usabilidade são conceitos que visam orientar a elaboração do design de interação. Eles são produto do conhecimento de diversas áreas, da experiência e do senso comum. Embora não estabeleçam exatamente o que deve ser feito, dão indicações valiosas do que uma interface deve oferecer ao usuário, consideradas as especificidades de cada contexto de desenvolvimento.

Jakob Nielsen é uma das maiores referências em interação humano-computador. Ele desenvolveu 10 princípios gerais, as 10 heurísticas de usabilidade (NIELSEN, 1994), para guiar o desenvolvimento nessa área. São elas:

1. **Visibilidade do status do sistema** - O sistema deve informar os usuário o que está acontecendo com *feedback* apropriado em tempo razoável.
2. **Correspondência entre o sistema e o mundo real** - O sistema deve usar palavras, frases e conceitos familiares aos usuários. Seguir convenções do mundo real, fazer informações aparecerem em ordem lógica e natural.
3. **Controle e liberdade do usuário** - Frequentemente usuários irão selecionar funções do sistema por engano e precisam de uma “saída” clara. O sistema deve suportar desfazer e refazer tarefas.
4. **Consistência e padrões** - Usuários não devem se questionar se diferentes palavras e botões significam a mesma coisa. Deve-se seguir convenções adequadas à plataforma.
5. **Prevenção de erros** - Ainda melhor do que boas mensagens de erro, é um design cuidadoso que evita sua ocorrência. Deve-se ou eliminar condições de erro ou sempre verificá-las e apresentar aos usuários uma opção de confirmação antes da realização de uma ação.
6. **Reconhecer é melhor do que lembrar** - Minimizar o número de elementos que o usuário deve recordar tornando objetos, ações e opções visíveis. O usuário não deve precisar lembrar de informações de outra parte do diálogo. Instruções para uso do sistema devem ser visíveis ou facilmente recuperáveis quando necessário.
7. **Flexibilidade e eficiência de uso** - Aceleradores - não vistos por usuários inexperientes - podem permitir acelerar a interação para usuários experientes, de modo que o sistema atenda a usuários inexperientes e experientes. Permitir aos usuários personalizar ações frequentes.
8. **Design estético e minimalista** - Diálogos não devem conter informações irrelevantes ou raramente usadas. Toda unidade de informação extra em um diálogo compete com as unidades de informação relevantes e diminuem sua visibilidade.

9. **Ajudar usuários a reconhecer, diagnosticar e se recuperar de erros** - Mensagens de erro devem ser expressas em linguagem natural (não em códigos), indicar precisamente o problema e sugerir uma solução construtiva.
10. **Ajudar e documentar** - Mesmo que seja preferível o sistema poder ser usado sem documentação, pode ser necessário fornecê-la. Qualquer informação com o propósito de ajudar o usuário deve ser fácil de buscar, focada nas tarefas do usuário, listar passos concretos a serem seguidos e não ser muito extensa.

### 2.1.2 Processo de design de interação

O processo de design de interação pode ser descrito por algumas atividades básicas representadas no fluxograma da Figura 1. A primeira etapa é a empatia com o usuário, ou seja, procurar entender suas necessidades e o contexto de uso do sistema. Na segunda etapa do design centrado no usuário, as necessidades identificadas anteriormente são transformadas em requisitos para o projeto de interação. No terceiro passo, são desenvolvidas propostas de solução com base nos requisitos escolhidos. Em seguida, o quarto etapa é primordial, a avaliação das soluções propostas. Todo o processo é iterativo até que se atinja uma solução que atenda às necessidades do usuário e os requisitos de projeto.

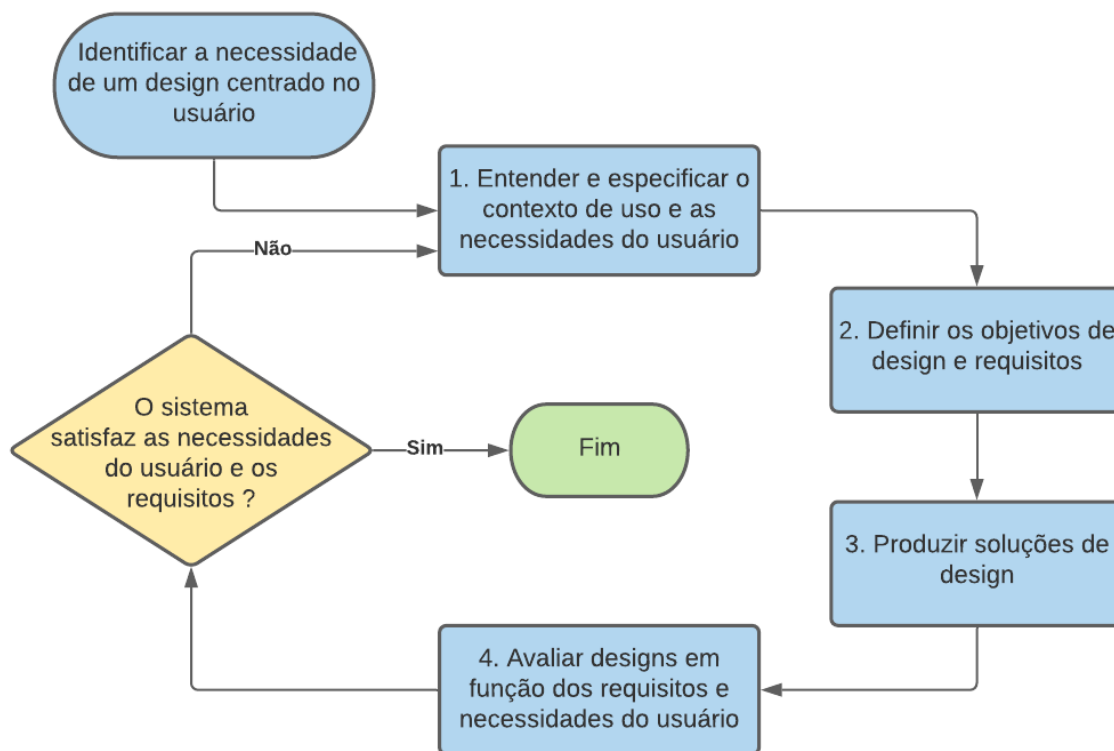
Na próxima seção serão introduzidas a fundamentação teórica do cálculo de  $T_c$  segundo os conceitos da física quântica, as aproximações que permitem seu cálculo computacional e as etapas executadas com o pacote QE para obtenção do valor  $T_c$  de um material. Tendo em vista que o projeto de interação com usuário desenvolvido neste trabalho tem por objetivo facilitar as atividades descritas a seguir, esse conhecimento é base para a compreensão do contexto de uso e das necessidades do usuário do grupo de pesquisa em supercondutividade.

## 2.2 Cálculo da temperatura crítica de supercondutividade

A teoria física moderna sugere que, em última instância, todos os fenômenos são resultado da interação da matéria (elétrons, prótons e nêutrons) segundo as forças fundamentais do universo: força gravitacional, força eletromagnética, força nuclear forte e força nuclear fraca.

A força gravitacional é a mais fraca delas. Muitos fenômenos do nosso cotidiano e visíveis a olho nu estão relacionados a ela. As forças nuclear forte e fraca são as mais intensas. Elas garantem a integridade do núcleo dos átomos, ou seja, a manutenção da quantidade de nêutrons e prótons; sendo os últimos, o número de prótons, o que define um elemento químico. Fenômenos como o nascimento de estrelas e a geração de energia nuclear estão relacionados a elas.

Figura 1 – Etapas de desenvolvimento do design.



Fonte: Adaptação, ISO-13407

A força elétrica, por sua vez, é responsável pela junção dos diferentes átomos em moléculas e de moléculas em materiais. Ela explica os fenômenos químicos e as propriedades dos materiais, como condutividade, magnetismo, transições de fase e estruturais. Tais fenômenos são resultado das interações dos elétrons presentes em cada átomo. Por exemplo, é o arranjo dos elétrons nas moléculas de água que a tornam um solvente universal, assim como o arranjo de elétrons no cobre o tornam um bom condutor de eletricidade.

A teoria da física quântica moderna permite modelar a estrutura eletrônica dos materiais a ponto de inferir suas propriedades teoricamente com sucesso (HAFNER; WOLVERTON; CEDER, 2006). Esse conhecimento é amplamente usado na ciência dos materiais para aperfeiçoar e inclusive prever novas estruturas com as propriedades desejadas. Esse tipo de estudo, que parte unicamente da teoria, é chamado de cálculos *ab initio*, que significa “primeiros princípios”. Nesse processo, as ferramentas computacionais tem um papel central.

No estudo da supercondutividade, os cálculos de primeiros princípios possuem um papel muito importante. Novos materiais supercondutores já foram previstos primeiro teoricamente e depois comprovados por experimentos (BI et al., 2018). Sua previsão

teórica envolve cálculos de grande complexidade, resolvidos com o auxílio de ferramentas computacionais. O pacote QE (GIANNOZZI et al., 2017) é uma poderosa ferramenta de código aberto utilizada para diversos cálculos de estrutura eletrônica, incluindo o cálculo de  $T_c$ , altamente relevante no estudo da supercondutividade

### 2.2.1 Solução computacional de um sistema quântico

Faz-se necessário solucionar as equações básicas da mecânica quântica para descrever as interações microscópicas dos átomos de um material. Diante disso, a equação de Schrödinger é especialmente importante pois determina a função de onda do sistema, seja ele um átomo, um elétron ou um sólido, contendo toda a informação sobre os estados, e evolução do sistema. No entanto, ela não possui solução analítica para sistemas complexos com diversos átomos e elétrons. Mesmo as aproximações numéricas são inviáveis para grandes sistemas.

Esse problema foi solucionado pela Teoria do Funcional da Densidade (DFT - *Density Functional Theory*) (HOHENBERG; KOHN, 1964), que rendeu a Walter Kohn o prêmio nobel de química de 1998. A DFT transforma o problema de determinar todas as interações elétron-elétron em um funcional (função que recebe como argumento outra função) de sua densidade eletrônica, sendo esta uma função de apenas três coordenadas espaciais. A formulação exata do funcional que tornaria a solução do novo problema equivalente à da equação de Schrödinger não é conhecida, mas os funcionais aproximados permitem descrever com precisão muitas propriedades dos materiais (HAFNER; WOLVERTON; CEDER, 2006).

Dessa forma, a complexa equação de Schrödinger para vários corpos é substituída pelas equações de Kohn-Sham. A solução computacional das equações de Kohn-Sham ocorre por um método iterativo e pela expansão da função de onda do sistema em um conjunto de funções de onda base, combinadas linearmente para aproximar a função de onda verdadeira. O QE utiliza uma base de ondas planas. O número de funções base é determinado pela energia de corte que equivale à maior energia cinética de uma componente de onda da solução.

Outra aproximação importante para a determinação do estado do sistema é a utilização de Pseudopotenciais. O átomo pode ser modelado como um caroço interno (formado pelo núcleo e elétrons próximos a ele) e os elétrons de valência. Os elétrons de valência, por estarem fracamente ligados ao núcleo são responsáveis pela maior parte das ligações químicas e propriedades dos materiais. Os elétrons próximos ao núcleo sofrem grande força de atração e pouco participam das ligações químicas, no entanto, o potencial varia muito nessa região. Os Pseudopotenciais representam o caroço interno do átomo por funções mais simples, mas com potencial equivalente. Assim, é possível obter uma função de onda para o sistema com menos componentes básicas, eliminando a necessidade

de ondas planas de alta frequência que usualmente são necessárias à representação do comportamento da função de onda próxima ao núcleo. Isto reduz o custo computacional simplificando os cálculos de estrutura eletrônica (SILVA, 2010).

### 2.2.2 Teoria da supercondutividade

Embora ainda não exista uma teoria geral para a supercondutividade, grande parte de seus fenômenos foram explicados pela teoria BCS, que ficou amplamente conhecida pelas iniciais dos físicos que a propuseram e lhes concedeu o prêmio nobel de 1972. Segundo a teoria BCS, o fenômeno da supercondutividade se origina no acoplamento de pares de elétrons que passam a possuir uma interação atrativa superior à repulsão de Coulomb. O surgimento de uma fase supercondutora é favorável dadas as condições específicas de interação elétron-fônon que propiciam a formação dos pares de elétrons acoplados, chamados de Pares de Cooper (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957).

Um fônon é a medida de um quantum de vibração em um retículo cristalino. Um cristal pode vibrar de maneira extremamente complexa. No entanto, tal vibração pode ser descrita através da superposições de movimentos mais simples chamados modos normais dados por  $\eta e^{-i\omega t}$ , em que  $\eta$  é a amplitude do modo e  $\omega$  sua frequência espacial (KANEKO, 2012). Esses modos normais de vibração podem alterar a configuração de cargas do material. Cada estrutura cristalina permite modos vibracionais próprios cujas características, como frequência e direção, dependem do arranjo espacial de seus átomos. Os modos normais de vibração, ou seja, a distribuição de fônons, são também atributos importantes para a determinação das propriedades de um material. Por isso é necessário calcular além do seu estado eletrônico, seu estado vibracional.

### 2.2.3 Cálculo de $T_c$ por meio do pacote Quantum ESPRESSO

O cálculo de  $T_c$  por meio do pacote QE requer a utilização de cinco programas: *Pwscf*, *Phonon*, *q2r*, *matdyn* e *lambda*<sup>1</sup>. O primeiro deles, *Pwscf*, permite a realização de cálculos de estrutura eletrônica com base na DFT, utilizando pseudopotenciais e uma base de ondas planas. O programa recebe como entrada as informações da estrutura cristalina, os pseudopotenciais de cada elemento químico e parâmetros internos do cálculo. Um parâmetro de especial importância é o número de pontos  $k$  que amostra a primeira zona de Brillouin e será explicado a seguir.

Um cristal pode ser representado por sua célula unitária, ou seja, a menor unidade do arranjo espacial de seus átomos que carrega todas as informações da rede e, quando replicada, permite a obtenção da rede cristalina. A partir da rede cristalina se obtém a rede recíproca, que pode ser interpretada como uma transformação do espaço real para o

<sup>1</sup> a documentação dos programas pode ser acessada em: <<https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual/specific-documentation>>

domínio das frequências espaciais. É possível fazer uma analogia do espaço recíproco com o domínio da frequência na análise de sinais elétricos. No entanto, as ondas no problema de quântica são analisadas em função do espaço e não do tempo.

Assim como o a rede cristalina do espaço real possui uma célula unitária, a rede recíproca pode ser definida a partir de uma célula primitiva denominada primeira zona de Brillouin. Se a rede de um cristal no espaço real for definida pelos vetores:  $a\hat{i}, b\hat{j}, c\hat{k}$ , sua rede recíproca será definida pelos vetores:  $\frac{2\pi}{a}\hat{i}, \frac{2\pi}{b}\hat{j}, \frac{2\pi}{c}\hat{k}$ . Formalmente, obtém-se uma frequência  $k$  do espaço recíproco como  $k = \frac{2\pi}{\text{textit{lambda}}}$ , em que *textit{lambda}* é o comprimento de onda. Os pontos  $k$  dentro da zona de Brillouin representam uma base completa para todas as funções de onda, por isso essa zona é extremamente relevante para cálculos de DFT.

O programa *Pwscf* realiza o cálculo da estrutura eletrônica do material por meio de uma amostragem da primeira zona de Brillouin. Uma entrada de pontos  $k$  (3,3,3) representa 3 amostras em cada dimensão, totalizando 9 pontos. Quanto maior o número de pontos, mais precisa é a solução, no entanto, o tempo de cálculo aumenta consideravelmente.

Posteriormente, utiliza-se o programa *Phonon* para calcular os estados vibracionais da rede cristalina, os fônons. A descrição de fônons também é feita a partir do espaço recíproco, amostrando a primeira zona de Brillouin. No entanto, as amostras são rotulados como uma rede de pontos  $q$ , em vez de  $k$ , para diferenciar os dois tipos de partículas (elétrons e fônons). Também são calculados valores da matriz de acoplamento elétron-fônon, que representam a influencia dos fônons na configuração de cargas do material e, portanto, na estrutura eletrônica.

O programa *q2r* opera uma transformada de Fourier sobre os valores obtidos pelos programas *Pwscf* e *Phonon* para trazê-los do espaço recíproco para o espaço real. Posteriormente o programa *matdyn* calcula, a partir dos resultados anteriores, as constantes de força de acoplamento elétron-fônon. Por fim, o programa *lambda* calcula o valor de  $T_c$  aplicando a fórmula de McMillan (MCMILLAN, 1968), utilizando os coeficientes de acoplamento elétron-fônon.

Todos os programas são operados pelo terminal e recebem como entrada um arquivo de texto contendo os parâmetros que serão utilizados na simulação. Com exceção do *Pwscf*, os cálculos dos demais programas dependem dos resultados do programa anterior. O compartilhamento de dados ocorre a partir de parâmetros que indicam diretórios e nomes dos arquivos compartilhados. Assim, um programa anterior e seu subsequente possuirão uma variável com mesmo valor indicando os arquivos de saída do primeiro que serão entradas do segundo. Portanto, um cálculo típico de  $T_c$  envolve o uso de inúmeras variáveis e arquivos de entrada interdependentes em diversos programas.

### 2.2.4 Software ACESC

O software ACESC foi resultado do trabalho de estágio da concluinte no LNLS. O programa desenvolvido tem por objetivo automatizar as diversas etapas de cálculo de  $T_c$  com o pacote QE. Dessa forma reduziu-se consideravelmente o número de parâmetros do cálculo e o tempo de preparação dos arquivos da simulação.

O compartilhamento de dados entre os programas do QE foi encapsulado pela lógica do programa. Apenas os parâmetros de significado físico foram mantidos no nível do usuário. As estradas do programa foram reduzidas para um arquivo de texto único de parâmetros e um arquivo de formato cif (*Crystallographic Input Information*), que contém todas as informações da estrutura cristalina. Os arquivos de saída da simulação são organizados em um diretório único com subdivisões para: os arquivos de entrada de cada programa do QE gerados; os arquivos de saída de cada programa do QE e os arquivos de cálculo intermediários do QE não destinados a leitura humana.

No entanto, o programa continua sendo operado pelo terminal com um arquivo de texto como entrada. Esta não é situação ideal para os usuários do laboratório. Em virtude disso, identificou-se a necessidade de um projeto de interação com o usuário para complementar a solução de automação desenvolvida, o qual será descrito nos capítulos seguintes.

## 3 Processo de Definição de Requisitos

Neste capítulo serão descritas as atividades desenvolvidas para a definição de requisitos do projeto. A primeira delas é a análise de softwares para pesquisa científica existentes. Em seguida, descreve-se o processo de empatia com o usuário, realizado a partir de entrevistas com pesquisadores e definição de personas. E, por fim, são determinados os objetivos e requisitos de design.

### 3.1 Análise de softwares para pesquisa científica

Diversos campos de pesquisa científica se beneficiam de ferramentas de software, seja para realizar simulações ou analisar dados experimentais. Novas ferramentas são desenvolvidas constantemente para esses fins. Muitas vezes há diversas iniciativas de código aberto para a resolução de um mesmo problema. Diante disso surgem algumas dificuldades: cada projeto independente requer aprendizados específicos de como o software funciona; muitos softwares tornam-se bastante complicados e algumas tarefas requerem a utilização de vários deles; a documentação é de difícil acesso; quanto mais preciso é um programa para simulações, mais extenso e complexo é o conjunto de variáveis a serem definidas.

Alguns exemplos de programas utilizados pelo grupo de pesquisa em supercondutividade do LNLS são: o pacote QE, para simulações de estrutura eletrônica e o pacote FDMNES <sup>1</sup>, para simulação de espectroscopia de raios X. Ambos não possuem interface gráfica e são operados a partir de arquivos de texto de entrada. Existem algumas iniciativas independentes para o desenvolvimento de interfaces mais amigáveis, no entanto elas não suportam todas as funcionalidades dos pacotes originais.

Um grande problema se instala nesse cenário. O pesquisador pode precisar gastar mais tempo para aprender as técnicas dos programas do que pensando criticamente e desenvolvendo a pesquisa. Evidencia-se a necessidade do design de interação nesse contexto para permitir melhor aproveitamento do trabalho dos pesquisadores. Muitas comunidades científicas trabalham para resolver isso. Algumas estratégias importantes são: criar pacotes que integram vários programas para um mesmo propósito, fornecer interfaces gráficas intuitivas e automatizar rotinas de simulação. O projeto CCP4i2 <sup>2</sup> é um exemplo de sucesso de uma comunidade científica que se uniu para melhorar a experiência dos usuários, unificando todo o desenvolvimento de software em uma determinada área com uma interface única. Esse projeto será descrito a seguir.

<sup>1</sup> <<http://fdmnes.neel.cnrs.fr/>>

<sup>2</sup> <<http://ccp4i2.fg.oisin.rc-harwell.ac.uk/>>



### 3.1.1 Projeto CCP4i2

O projeto CCP4 (*Collaborative Computer Project 4*) reúne um conjunto de programas de código aberto, bibliotecas de sub-rotinas e dados para determinar a estrutura de macromoléculas. Essa é uma área de estudo da biologia estrutural conhecida como cristalografia de proteínas, cujo objetivo é determinar a posição dos átomos nos compostos a partir de experimentos de cristalografia com raios X.

O projeto começou em 1979, a partir de um fórum para união dos grupos de desenvolvimento de software para cristalografia de macromoléculas do Reino Unido. Há mais de 30 anos muitas fontes contribuíram para seu desenvolvimento. Hoje o pacote CCP4 é conectado por padrões estabelecidos para os arquivos de dados, mas mantém bastante flexibilidade para integrar diversas funcionalidades sem um design restritivo. As funções podem ter mais de uma implementação, fornecendo diversos caminhos para os usuários resolverem os problemas.

O CCP4 é uma das principais referências mundiais na área de cristalografia de macromoléculas. Esse é um exemplo de uma comunidade ativa e colaboradora que conseguiu unir em um único projeto as ferramentas desenvolvidas na área e, assim, fornecer a melhor experiência para o usuário. Ainda, é responsável por vários eventos que movimentam a comunidade, além de fornecer desenvolvimento contínuo de software.

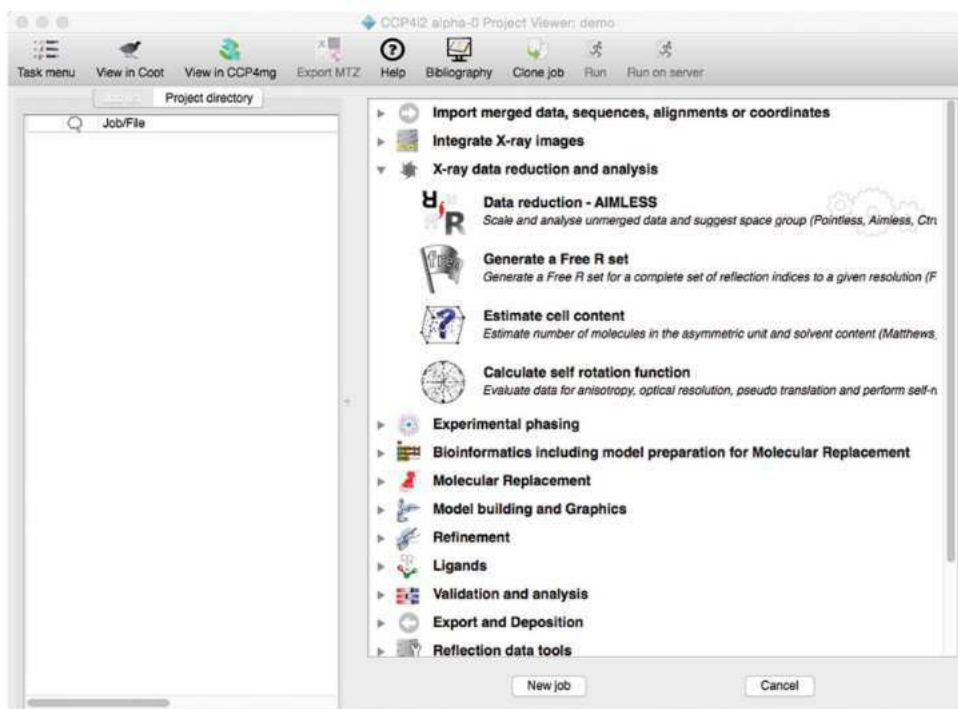
Antes de 2003, os programas do pacote CCP4 eram acessados apenas por linha de comando. A primeira interface gráfica unificada do projeto, CCP4i(2002) (POTTERTON et al., 2003), tornou a solução de estruturas mais simples e rápida, forneceu ferramentas para visualizar arquivos e rastrear todo o processo de cálculo em banco de dados. Em 2018, foi lançada sua mais nova versão CCP4i2 (POTTERTON et al., 2018), cujos objetivos principais são fornecer automação de tarefas em alto nível e eliminar a necessidade de conhecimentos especializados dos formatos de arquivos, entradas e logs de programas.

O fluxo de tarefas é claro e permite que o foco sejam as decisões científicas por trás delas. Ainda assim, os dados subjacentes continuam acessíveis. Essa estrutura gera acessibilidade para pesquisadores iniciantes e, ao mesmo tempo, permite ajustes finos para os mais experientes.

O processo de solução de uma estrutura é normalmente um projeto. Cada projeto é formado por vários trabalhos que executam tarefas automatizadas. Cada trabalho possui dados de entrada e saída associados, salvos em arquivos de texto. Os pesquisadores não precisam se preocupar com a formatação desses arquivos, que são tratados similarmente pelo programa como objetos de dados. Cada projeto é associado a um diretório contendo todos os seus respectivos arquivos salvos de forma organizada e encadeada.

A integração de diferentes tarefas que utilizam programas distintos é garantida por 3 elementos. O primeiro deles é a existência de uma interface única com funções bem

Figura 2 – Tela inicial da interface CCP4i2.



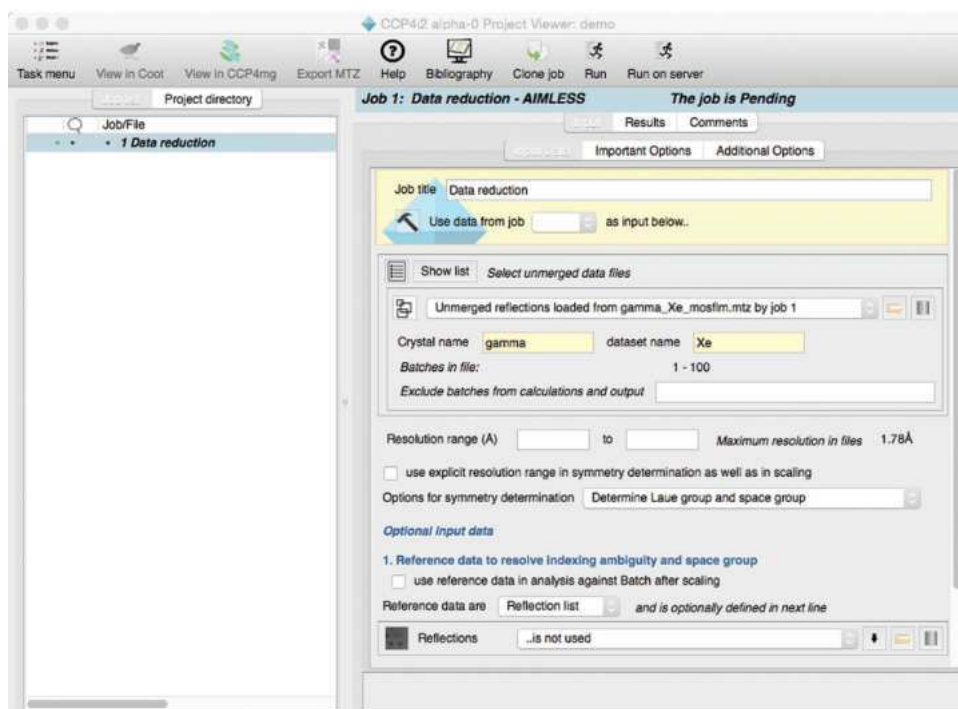
Fonte: (POTTERTON et al., 2018)

definidas para as tarefas que permite encadeá-las e incrementar a automação de processos; cada interface é responsável por lidar internamente com especificidades dos programas utilizados, como escrita de arquivos de entrada, chamada de sub-rotinas e apresentação de resultados. O segundo elemento é a existência de interfaces unificadas para tipos de dados compartilhados por diferentes tarefas. O terceiro elemento é um banco de dados relacional, que guarda as informações de todos os arquivos associados a um projeto e seus diretórios.

A interface gráfica é responsável pela maior parte da experiência do usuário. Por isso, aspectos chave da interface CCP4i2 foram elencados como referências importantes para o projeto de interface desse trabalho. Na Figura 2 é mostrada a janela principal do programa. O quadro à esquerda apresenta todos os elementos de um projeto, suas respectivas tarefas e dados, dispostos em uma lista, em um modelo organizacional de árvore. O quadro à direita inicialmente apresenta uma lista de todas de tarefas disponíveis, em grupos correlatos.

Ao selecionar uma nova tarefa, o quadro da direita apresenta uma interface de entrada de dados e arquivos necessários, mostrado na Figura 3. Preenchidos os dados, é possível executar a tarefa e observar no quadro um log de execução em tempo real e, posteriormente, observar os resultados. Ao clicar em uma tarefa da árvore do projeto, é possível acessar seus dados de entrada, o relatório de execução e resultados. Ao clicar em um arquivo da árvore, é possível visualizar seu conteúdo com uma ferramenta gráfica apropriada para o tipo de dado.

Figura 3 – Tela para entrada de dados de uma tarefa na interface CCP4i2.



Fonte: (POTTERTON et al., 2018)

O programa também sinaliza entradas não válidas e entradas essenciais que faltam. A execução não é possível até que as inconsistências sejam resolvidas. Quando possível, algumas entradas são pré-determinadas com valores de tarefas anteriores ou valores padrões, simplificando ainda mais a preparação da tarefa. As tarefas possuem ícones que identificam seu estado, seja de preparação, execução ou finalização.

É possível renomear arquivos para facilitar a compreensão ao retomar um projeto. Também é possível adicionar comentários que ajudem a interpretar os resultados dos cálculos. O projeto fornece extensa documentação para usuários e desenvolvedores, como tutoriais no YouTube, e possui pessoal fixo trabalhando continuamente para expandir funcionalidades e fornecer suporte.

O aprendizado do estudo do projeto CCP4i2 foi resumido em seis princípios para a interação com usuários no contexto de pesquisas científicas, apresentados na Tabela 1.

## 3.2 Entrevistas com pesquisadores

Realizou-se uma série de entrevistas com os pesquisadores para investigar suas experiências passadas com softwares de simulações e quais dificuldades tiveram. Outro ponto de investigação foram as atividades experimentais que realizam para delinear como uma ferramenta de simulações poderia melhor representá-las. Por fim, houve um espaço para cada entrevistado descrever como seria, na sua visão, uma ferramenta ideal.

Tabela 1 – Princípios de usabilidade para softwares destinados a pesquisa científica.

<b>Princípios</b>	<b>Exemplos de aplicação</b>
Automação e simplificação	Automatizar o máximo de tarefas que independam de decisões científicas, fornecer valores padrões para parâmetros, quando possível e diminuir o número de entradas do usuário
Prevenção contra falhas	Validar valores de parâmetros, agrupar em uma camada independente as especificidades de arquivos de entrada
Acompanhamento de execução	Atualização de <i>status</i> de tarefas em tempo real, logs de execução de tarefas
Reprodutibilidade	Rastreamento de todas as etapas e parâmetros utilizados, permitir a repetição fidedigna dos cálculos
Fácil acesso aos dados	Visualização gráfica intuitiva, disposição de todos os dados organizadamente na interface, ferramentas de personalização, como <i>tags</i> e comentários
Documentação	Informações claras e acessíveis para usuários e desenvolvedores, como tutoriais

Foram selecionados pesquisadores do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron que atuam na Linha de Luz EMA (*Extreme condition x-ray Methods of Analysis*) do Sirius, fonte de luz síncrotron gerenciada pelo laboratório. A linha foi projetada para possuir um alto brilho, necessário para pesquisas em pressões extremas, que exigem pequenos focos e análises com resolução temporal, que requerem um elevado fluxo de fótons. Todos os entrevistados têm linhas de pesquisa relacionadas a materiais supercondutores.

A partir das entrevistas, construiu-se personas que representassem os usuários modelo do sistema, as quais são apresentadas nas Figuras 4, 6, 7, 5.

### 3.2.1 Análise das informações coletadas

Algumas dificuldades foram recorrentes nas entrevistas e merecem destaque:

1. **aprendizado da ferramenta;**
2. **simulação da variação de parâmetros;**
3. **poluição visual na entrada de parâmetros;**
4. **visualização de resultados;**
5. **erros de digitação.**

Figura 4 – Persona 1.

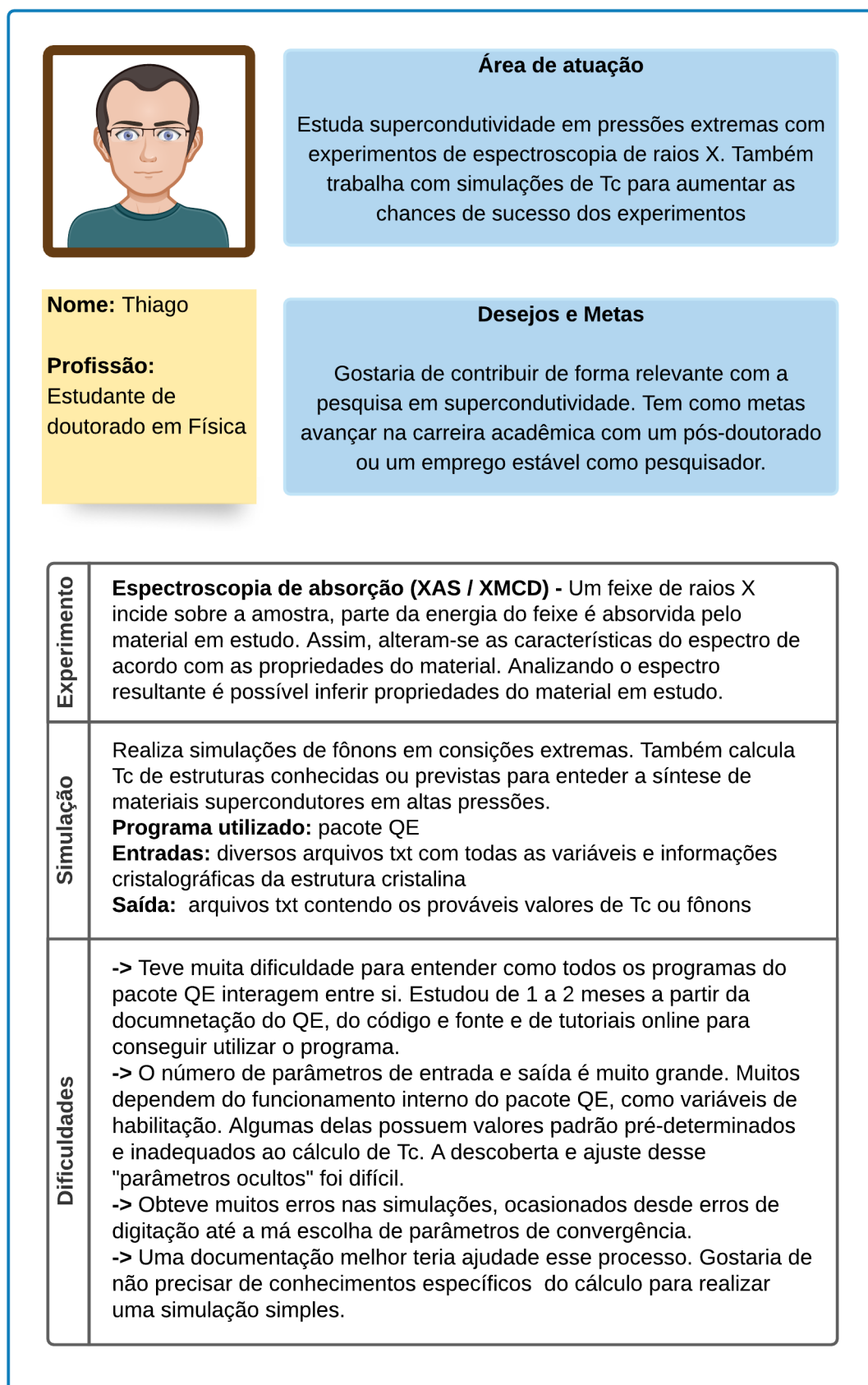



Figura 5 – Persona 2.



**Área de atuação**

Trabalha com matéria condensada, estuda excitações eletrônicas com espectroscopia. Estuda materias supercondutores não convencionais e super-hidretos.

**Nome:** Pedro

**Profissão:**  
Pesquisador  
Experimental


**Desejos e Metas**

Gostaria de desvendar o comportamento de supercondutores não contemplados pela teoria BCS e, possivelmente explicar os mecanismos das propriedades dos mateirias super-hidretos e supercondutores não convencionais

<b>Experimento</b>	<p><b>Espectroscopia Raman</b> - Incide-se um laser sobre a amostra em estudo. O material sintoniza parte da energia do laser, gerando um espalhamento inelásticamente na frequência. Ao analisar a radiação com frequência diferente da incidente, é possível inferir os modos de vibração das moléculas que alteraram o laser incidente. Os modos de vibração estão associados a propriedades importantes da matéria.</p>
<b>Simulação</b>	<p>No meio do doutorado precisou calcular fônons de supercondutores não convencionais e comparar com os experimentos.</p> <p><b>Programa utilizado:</b> pacote QE</p> <p><b>Entradas:</b> dois arquivos txt com todos os parâmetros e informações cristalográficas da amostra para dois programas do QE</p> <p><b>Saída:</b> arquivo .txt com as frequências e distribuição dos fônons</p>
<b>Dificuldades</b>	<p>-&gt; O uso do QE foi muito difícil. Precisou obter a energia dos fônons, saber suas posições e prever como se comportariam com a variação da temperatura e a contração da estrutura do material.</p> <p>-&gt; Gostaria de comparar o cálculo da simetria de grupos com as simulações dos fônons no QE</p>



Figura 6 – Persona 3.



**Área de atuação**

Trabalha com supercondutividade e matéria condensada experimental em altas pressões. Aplica técnicas de raios X (difração, espectroscopia de absorção, XMCD) para estudar fenômenos de magnetismo e supercondutividade

**Nome:** Ellen

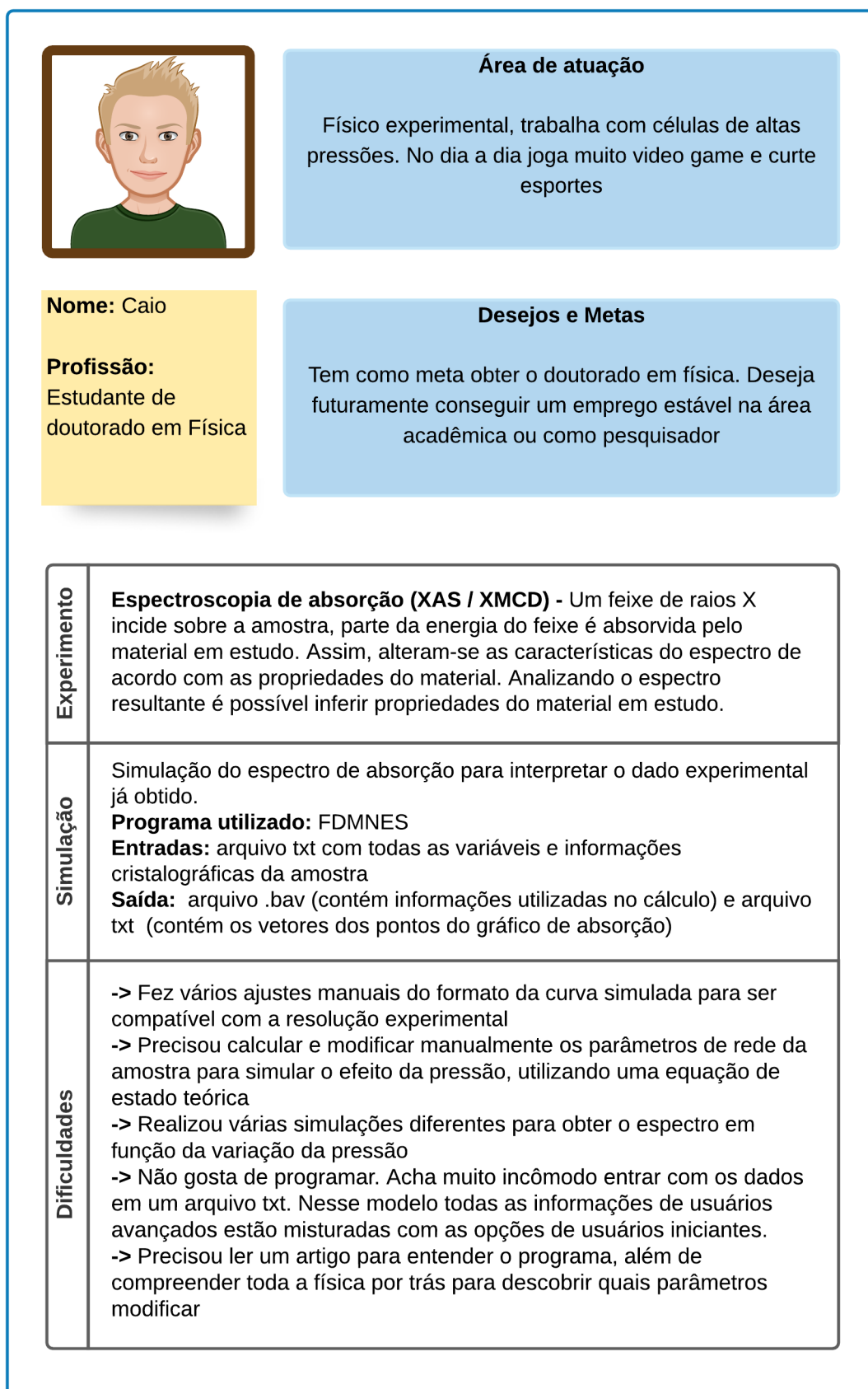
**Profissão:**  
Estudante de pós-doutorado em Física

**Desejos e Metas**

Crescer como cientista e colaborar com a ciência e assuntos que estão em aberto, como a supercondutividade. Ver um supercondutor operando em temperatura ambiente. Contribuir com uma das peças do quebra-cabeça da supercondutividade

<b>Experimento</b>	<p><b>Espectroscopia de absorção (XAS / XMCD)</b> - Um feixe de raios X incide sobre a amostra, parte da energia do feixe é absorvida pelo material em estudo. Assim, alteram-se as características do espectro de acordo com as propriedades do material. Analizando o espectro resultante é possível inferir propriedades do material em estudo.</p>
<b>Simulação</b>	<p>Realiza simulações do espectro de absorção para comparar com o dado experimental já obtido, ou prevê o espectro com a simulação para orientar o experimento.</p> <p><b>Programa utilizado:</b> FDMNES</p> <p><b>Entradas:</b> arquivo txt com todas as variáveis e informações cristalográficas da amostra</p> <p><b>Saída:</b> arquivo .bav (contém informações utilizadas no cálculo) e arquivo txt (contém os vetores dos pontos do gráfico de absorção)</p>
<b>Dificuldades</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>-&gt; Para simular experimentos variando a pressão precisa criar vários arquivos e rodar um por vez. Gostaria de poder escolher uma escala de pressões e os cálculos serem automáticos. A nomenclatura dos arquivos de saída identificaria a pressão utilizada</li> <li>-&gt; Quando erra a digitação do arquivo de entrada, precisa abortar a simulação</li> <li>-&gt; Teve muita dificuldade para entender os parâmetros do programa FDMNES no início de sua utilização</li> <li>-&gt; Precisa utilizar outro programa para visualizar os resultados da simulação no FDMNES. Visualizar os resultados mais facilmente é seu principal desejo</li> </ul>

Figura 7 – Persona 4.





A primeira delas foi a dificuldade de aprender a utilizar as ferramentas disponíveis. A necessidade de estudar artigos minuciosamente e compreender todas as variáveis avançadas para realizar uma simulação simples gera muita frustração para os usuários. Em especial, o pesquisador Pedro, mais familiarizado com a área experimental, desenvolveu grande antipatia em relação às ferramentas de simulação. Esse cenário não está de acordo com o sexto e décimo princípios de usabilidade apresentados na sessão 2.1.1, "Reconhecer é melhor do que lembrar" e "Ajudar e documentar", respectivamente.

O segundo problema recorrente foi a simulação de propriedades que variam com as condições da amostra, como temperatura e pressão. Nesses casos, é preciso variar manualmente os parâmetros e realizar uma série de simulações individuais. Esse problema é recorrente na linha EMA, na qual um dos principais objetivos é o estudo de materiais em condições extremas, como altíssimas pressões. Destaca-se a violação do segundo e sétimo princípios de usabilidade, "Correspondência entre o sistema e o mundo real" e "Flexibilidade e eficiência de uso", respectivamente.

Destaca-se ainda, as experiências negativas dos usuários com a entrada de parâmetros poluída por diversas variáveis de uso avançado, ou seja, o sistema não possui um "Design estético e minimalista" (oitavo princípio de usabilidade). Destaca-se também a falta de ferramentas de visualização de resultados integradas à simulação, novamente, violando mais uma vez o segundo princípio de usabilidade.

Por fim, o sistema com entrada no formato de arquivo de texto não é robusto para prevenir erros. A digitação de qualquer caractere errado pode causar graves problemas, além dos do causados pela escolha inadequada de parâmetros físicos e de convergência. São violados o terceiro, quinto e nono princípios de usabilidade, "Controle e liberdade do usuário", "Prevenção de erros" e "Ajudar o usuário a reconhecer, diagnosticar e recuperar de erros".

Diante da violação de tantos princípios de usabilidade, fica evidente porque alguns pesquisadores tem forte antipatia às ferramentas de simulação. Os problemas adereçados nesta seção, juntamente com os bons exemplos observados no projeto CCP4i2, foram as principais fontes de informação que orientaram o projeto de interação para o pacote QE.

### 3.3 Definição dos objetivos de design e requisitos

Os objetivos de design foram desenvolver um sistema efetivo, eficiente e fácil de aprender. Efetivo de modo que atendesse às necessidades de simulação dos pesquisadores. Eficiente de modo que reduzisse ao máximo o tempo de preparação da simulação. Fácil de aprender de modo que um novo usuário possa utilizá-lo intuitivamente para uma simulação simples, mas caso precise ajustar parâmetros avançados, a informação esteja disponível e clara. A partir destes objetivos e das necessidades dos usuários, definiu-se os requisitos do

sistema.

Dentro do objetivo de efetividade, mapeou-se quais tarefas das simulações eram suportadas pelo pacote QE e poderiam ser incluídas no programa. São elas:

**Requisitos para efetividade:**

- O sistema deve calcular o valor de  $T_c$  de um material cristalino;
- O sistema deve calcular os fônons de um material cristalino;
- O sistema deve calcular a equação de estado de um material cristalino;
- O sistema deve permitir realizar as simulações com compressão da estrutura cristalina (correspondente a variação da pressão) em uma única etapa de preparação.

Dentro do objetivo de eficiência, pensou-se em soluções para minimizar as atividades que demandavam mais tempo na preparação das simulações, além da eliminação de erros. São elas:

**Requisitos para eficiência:**

- O sistema deve automatizar a escrita dos arquivos de entrada do QE;
- O sistema deve automatizar a obtenção de parâmetros da estrutura cristalina a partir de um arquivo *cif* de entrada;
- O sistema deve fornecer um banco interno de pseudopotenciais para todos os elementos da tabela periódica;
- O sistema deve fornecer um arquivo de saída *resultado* minimalista, com as principais informações de cada cálculo.

Por fim, o objetivo de fácil aprendizagem resultou nos seguintes requisitos:

**Requisitos para fácil aprendizagem:**

- O sistema deve fornecer valores padrão adequados a cada tipo de simulação para orientar usuários iniciantes;
- O acesso a variáveis avançadas deve ser opcional na etapa de definição de parâmetros;
- O sistema deve fornecer documentação acessível que explique de forma clara e direta o propósito de cada parâmetro e as etapas de cálculo;

- O sistema deve permitir fácil acesso a tutoriais e exemplos.

Neste capítulo, realizou-se um estudo de boas e más práticas de design para softwares de pesquisa científica. A partir desse conhecimento, foram definidos os objetivos e requisitos do sistema proposto para auxiliar as pesquisas em supercondutividade.

Esse conhecimento foi construído a partir da análise de bons projetos existentes e da experiência pessoal de vários pesquisadores. O projeto CCP4i2 carrega mais de 30 anos de experiência de como a comunidade científica de cristalografia de macromoléculas se organizou para melhor aproveitar as ferramentas computacionais disponíveis. As experiências dos pesquisadores na área de supercondutividade foram fundamentais para determinar as necessidades que o sistema precisava atender.

A seguir será descrita a solução de design de interação construída para atender os requisitos definidos neste capítulo.

## 4 Solução Proposta

Neste capítulo será apresentado o modelo de interação com usuário proposto para complementar o software ACESC. O projeto tem o objetivo de contemplar usuários não familiarizados com programação em linha de comando por meio de uma interface gráfica que suporte todas as funcionalidades do software ACESC e atenda aos requisitos de projeto determinados na seção 3.3. Ao mesmo tempo, será mantida a compatibilidade de arquivos de entrada e saída para o sistema com interação em linha de comando.

### 4.1 Descrição da interface gráfica

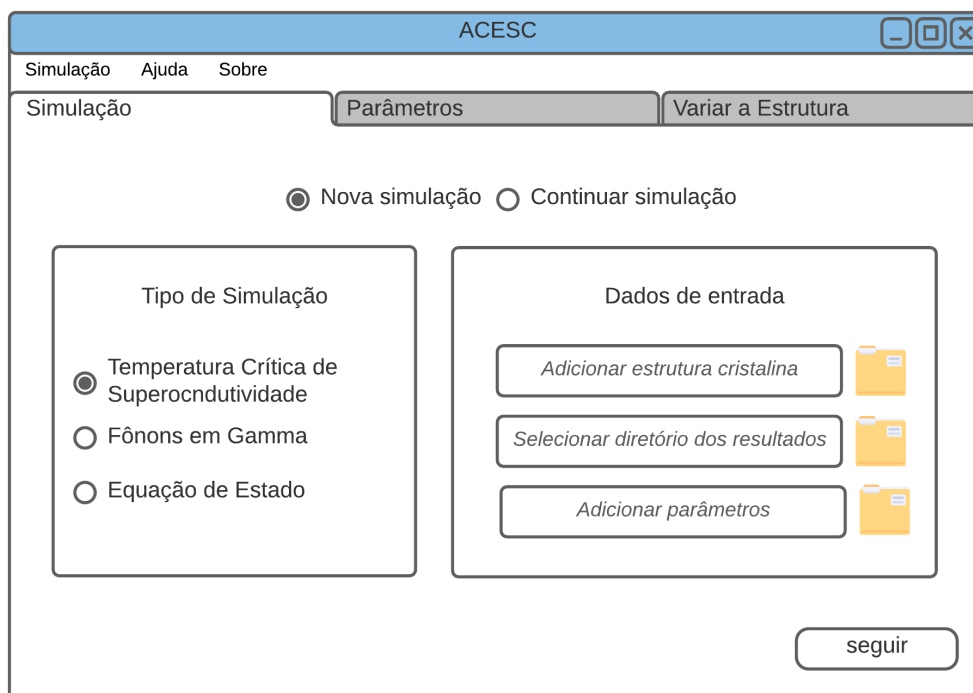
A interface proposta tem um modelo sequencial de tarefas. Cada tela corresponde a uma etapa essencial de preparação da simulação de propriedades da estrutura cristalina. A preparação da simulação foi dividida em três tarefas: escolha do tipo de simulação e arquivos de entrada, definição de parâmetros e, por fim, variação da estrutura cristalina. Escolheu-se um modelo de abas para permitir livre transição entre as tarefas. Essa escolha também foi inspirada na interface do projeto CCP4i2.

A tela principal possui dois modos. O primeiro deles é a definição de uma nova simulação e pode ser observado na Figura 8. Deve-se selecionar o tipo de simulação e os arquivos de entrada. A estrutura cristalina é um arquivo de formato cif que contém as informações do material que será estudado, esta entrada é obrigatória. O diretório dos resultados é o local no computador em que será criada a pasta contendo todos os arquivos referentes a simulação, esta entrada também é obrigatória. O arquivo de parâmetros é utilizado pelo programa em linha de comando. Na interface gráfica esta entrada é opcional, mas garante a compatibilidade das diferentes formas de interação. Assim é permitida, por exemplo, a replicação de resultados obtidos pela linha de comando. Caso usado, a etapa de definição de parâmetros é pulada.

O segundo modo da tela principal permite a continuação de um cálculo interrompido, pode ser observado na Figura 9. Essa função é especialmente importante para o cálculo de  $T_c$ , que envolve diversos programas do QE e a execução de cada programa é uma etapa demorada. Assim, caso haja uma interrupção, o trabalho anterior não é perdido, podendo continuar de onde parou. A única entrada necessária é o arquivo cif da pasta da simulação anterior.

Caso os dados escolhidos forem compatíveis, o botão de "seguir" é habilitado para a etapa de definição de parâmetros, como apresentado na Figura 10. Cada tipo de cálculo possui parâmetros padrões como uma sugestão para usuários iniciantes. Há ainda uma

Figura 8 – Tela principal para nova simulação.



Fonte: Autoria Própria, 2020.

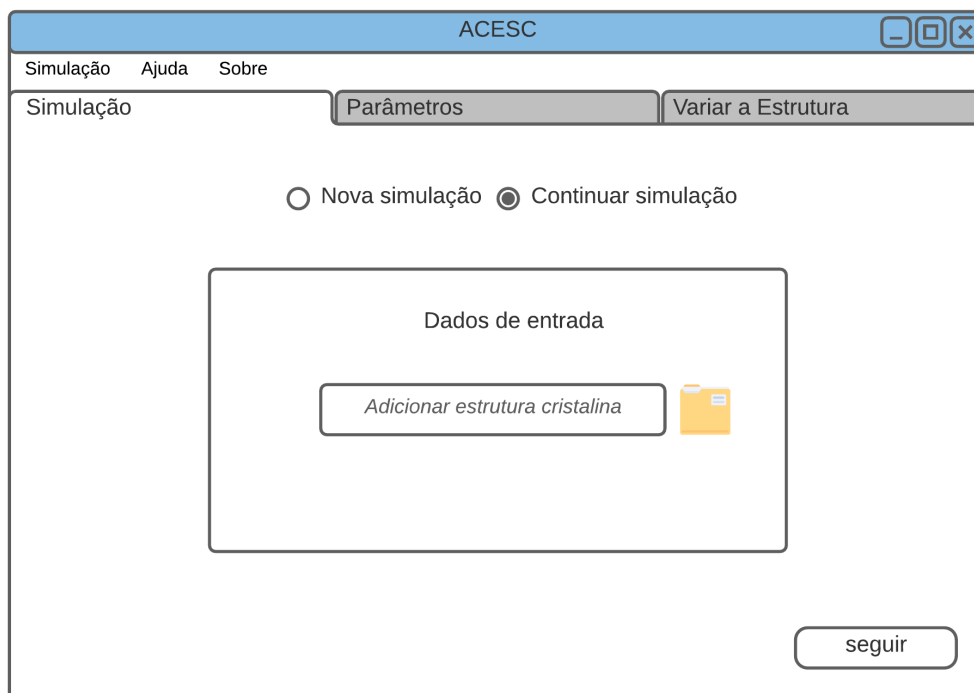
separação entre parâmetros básicos e avançados. Dessa forma, usuários inexperientes não são surpreendidos com variáveis de significado obscuro, as quais não precisam compreender de imediato. Destaca-se a opção de utilizar os pseudopotenciais padrões do programa ou selecionar um diretório que contenha outros pseudopotenciais que o usuário deseje utilizar.

A última etapa permite a variação da estrutura cristalina de modo que seja possível realizar várias simulações, representando a variação de pressão, com um único processo de preparação. Caso a compressão seja habilitada, escolhes-se o número de estruturas simuladas e os pontos inicial e final, segundo a tela da Figura 11. A porcentagem de compressão representa uma fração do volume da estrutura original. Quanto maior a pressão, menor é o volume da célula unitária da estrutura cristalina. Caso a opção não seja habilitada, apenas uma simulação é realizada a partir da estrutura cristalina original, escolhida na primeira etapa, Figura 12.

Finalizadas as três etapas de preparação, é possível clicar no botão "simular". Uma janela (com mesmo nome da pasta de resultados) é criada para informar o usuário do andamento da simulação, Figura 13. Assim, acompanha-se cada etapa, a leitura e validação dos arquivos de entrada e a execução de cada programa do pacote QE.

A interface também possui um menu fixo superior que permitem acessar, a qualquer momento, atalhos e informações importantes. O botão *Simulação* possui dois atalhos: um para a tela de nova simulação e outro para continuar simulação. Seu uso permite retornar

Figura 9 – Tela principal para continuar uma simulação interrompida.



Fonte: Autoria Própria, 2020.

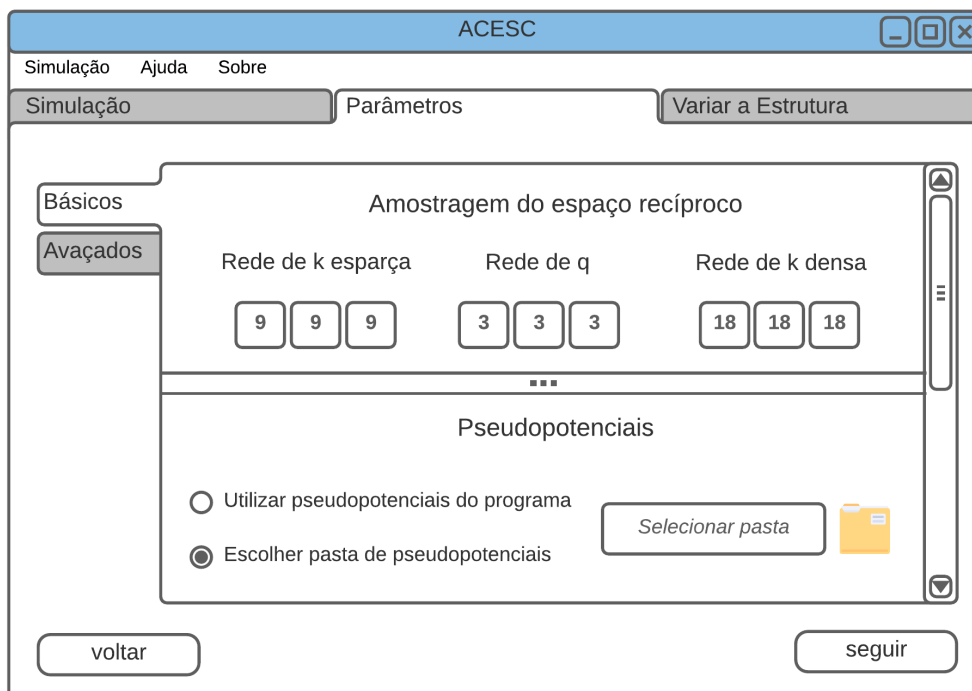
a situação inicial, apagando as informações inseridas pelo usuário. O botão *Ajuda* permite acessar a documentação do programa, com informações sobre os parâmetros e etapas do cálculos, assim como tutoriais e exemplos. O botão *Sobre* apresenta descrição do propósito do programa e contato dos desenvolvedores.

## 4.2 Descrição dos arquivos de saída

Os arquivos de saída de uma simulação são salvos em um diretório criado no local escolhido pelo usuário. O diretório recebe um nome composto pela estrutura cristalina e pelo tipo de simulação. A Figura 14 é um exemplo de saída do programa ACESC operado pelo terminal para a simulação de fônons do nióbio (Nb). A interface gráfica proposta terá o mesmo formato de saída, explicado a seguir.

O subdiretório *calc* contém arquivos intermediários do QE não destinados a leitura humana. O subdiretório *input* contém os arquivos de entrada para os programas do QE. O subdiretório *output* contém os arquivos de saída de cada programa do QE. A presença de três arquivos garante a reprodutibilidade do cálculo: o arquivo de descrição da estrutura cristalina (de formato *cif*), o arquivo de parâmetros (de formato *in*) e o banco de dados (de formato *db*). O arquivo *result* reúne as principais informações de interesse da simulação.

Figura 10 – Tela para entrada de parâmetros.



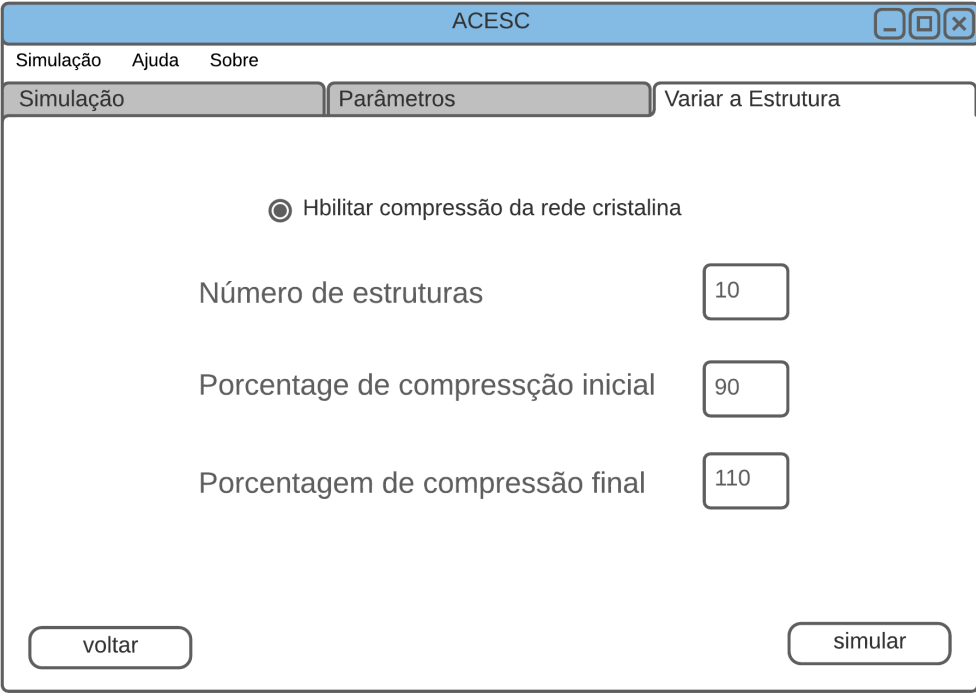
Fonte: Autoria Própria, 2020.

### 4.3 Avaliação dos requisitos e princípios de usabilidade

A solução proposta contempla todos os requisitos definidos na seção 3.3, atendendo a grande maioria das necessidades dos usuários. No entanto, ressalta-se que algumas das necessidades não foram atendidas. Um exemplo são as simulações de espectroscopia de absorção com o programa FDMNES. Esse tipo de simulação não é suportada pelo pacote QE.

A Tabela 2 reúne exemplos de características do sistema proposto que se adéquam aos princípios de usabilidade, revistos para o contexto de pesquisa científica na seção 3.1.1.

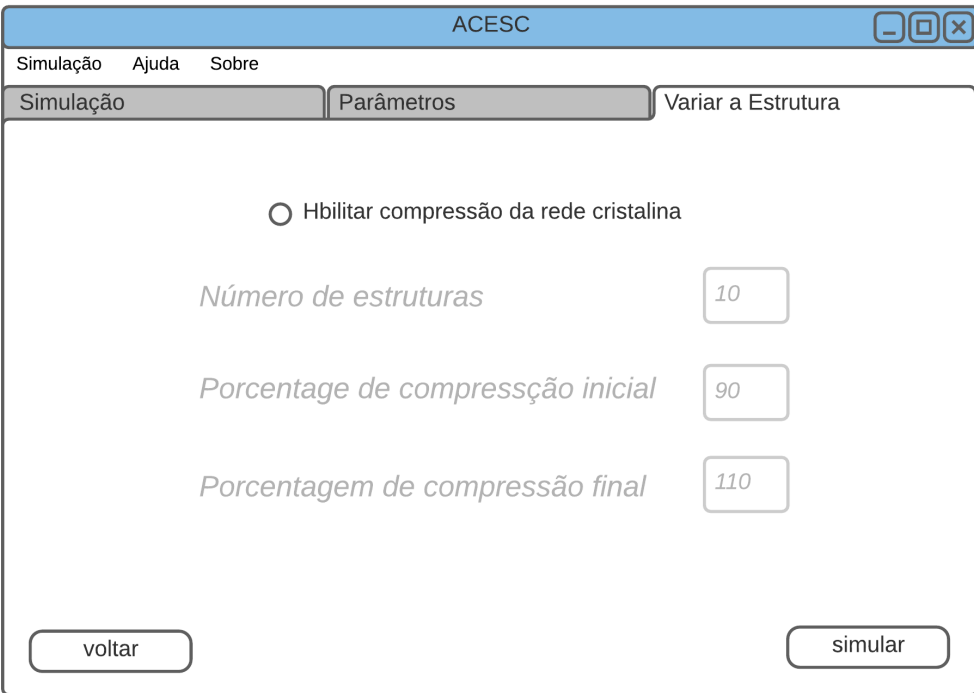
Figura 11 – Tela habilitada para compressão da estrutura cristalina.



The screenshot shows a window titled 'ACESC' with a menu bar containing 'Simulação', 'Ajuda', and 'Sobre'. Below the menu bar are three tabs: 'Simulação', 'Parâmetros', and 'Variar a Estrutura'. The 'Variar a Estrutura' tab is active. In the center, there is a radio button labeled 'Habilitar compressão da rede cristalina' which is selected. Below this are three input fields: 'Número de estruturas' with the value '10', 'Porcentage de compressão inicial' with the value '90', and 'Porcentagem de compressão final' with the value '110'. At the bottom left is a 'voltar' button and at the bottom right is a 'simular' button.

Fonte: Autoria Própria, 2020.

Figura 12 – Tela desabilitada para compressão da estrutura cristalina.

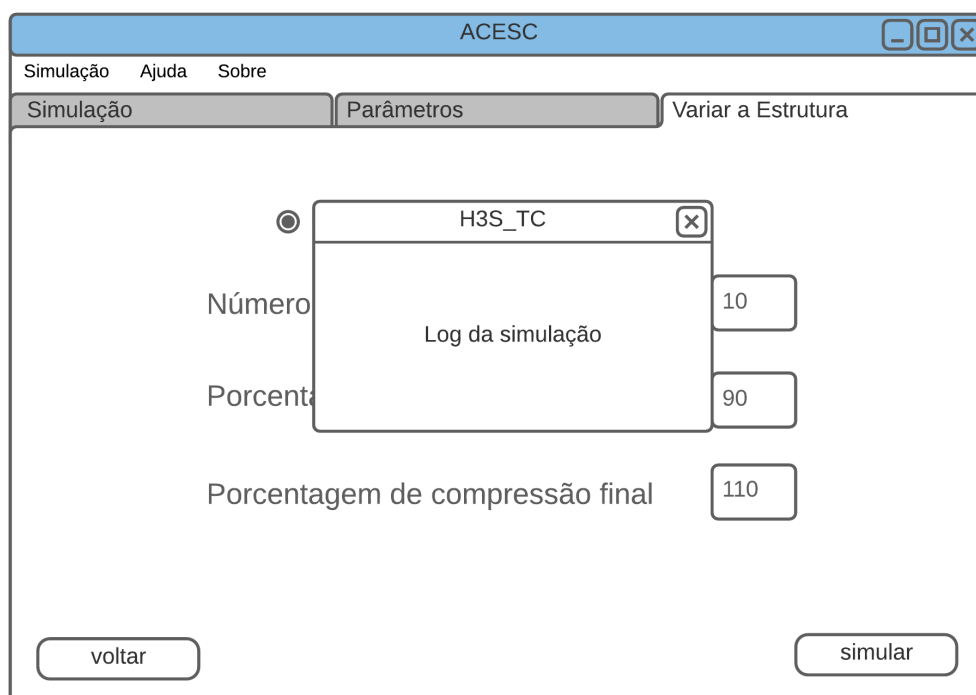


The screenshot shows the same 'ACESC' window as in Figure 11, but the 'Habilitar compressão da rede cristalina' radio button is now unselected. The text for the input fields is displayed in a lighter, disabled font: 'Número de estruturas' (10), 'Porcentage de compressão inicial' (90), and 'Porcentagem de compressão final' (110). The 'voltar' and 'simular' buttons remain visible at the bottom.

Fonte: Autoria Própria, 2020.



Figura 13 – Tela de simulação em andamento.



Fonte: Autoria Própria, 2020.

Figura 14 – Arquivos de saída de uma simulação de fônons.



Fonte: Autoria Própria, 2020.

Tabela 2 – Avaliação do sistema proposto em relação aos princípios de usabilidade para softwares destinados a pesquisa científica.

<b>Princípios</b>	<b>Exemplos de aplicação</b>
Automação e simplificação	Cada tipo de simulação representa a automação de uma sequência de programas do QE para um fim específico. Sugestão de variáveis padrão. Banco de pseudopotenciais. Automação de simulações com variação de pressão.
Prevenção contra falhas	Validar valores de parâmetros. Agrupar especificidades do QE em uma camada inferior a do usuário. Isolamento de parâmetros avançados.
Acompanhamento de execução	Janela para apresentação do log de execução da simulação.
Reprodutibilidade	Permite a entrada de um arquivo de parâmetros txt que encapsula todos os detalhes de um cálculo prévio.
Fácil acesso aos dados	Arquivo de saída "resultado", reunindo principais informações de interesse ao final do cálculo.
Documentação	Acesso na interface para documentação sobre parâmetros, tutoriais e exemplos

## 5 Discussão

O processo de cálculo de  $T_c$  com o pacote QE demandou mais de um mês de estudo para ser executado, segundo entrevista com um dos pesquisadores, apresentada na Figura 4. O projeto de interação proposto pretende reduzir esse tempo para poucos minutos, considerando uma simulação simples.

O sistema proposto foi planejado para atender às necessidades do usuário e funcionalidades do software ACESC buscando a forma mais simples possível do ponto de vista de implementação. Isso permite um desenvolvimento rápido, visto que a maior parte das funcionalidades da interface gráfica proposta refletem aspectos já implementado no programa ACESC, juntamente com um ganho substancial na experiência do usuário.

No entanto, há vários aspectos que poderiam ser mais explorados. Um exemplo é permitir total acesso aos resultados da simulação pela própria interface gráfica, como o CCP4i2 permite. Outro exemplo, também inspirado no projeto CCP4i2, é gerenciar as simulações como "projetos", e a interface permitir a transição entre diferentes trabalhos, e encadeamento de diferentes simulações. Um ponto também interessante é a inclusão de ferramentas de visualização de dados gráficas que se adéquem ao tipo de informação apresentada.

Embora bastante atrativas, estas soluções requerem uma grande reestruturação do projeto existente e desenvolvimento de ferramentas auxiliares como um banco de dados relacional. Há o risco dos ganhos em experiência do usuário não compensarem o trabalho despendido em um projeto maior, a depender das prioridades do grupo de pesquisa em supercondutividade no momento.

Um dos objetivos futuros para a linha EMA é um sistema de software único que interligue as simulações de propriedades dos materiais e o tratamento de dados experimentais obtidos na linha de luz. Sob essa ótica, o projeto CCP4i2 é um ótimo exemplo para inspirar uma solução bem mais abrangente, podendo incluir outros programas de simulação utilizados pelo grupo além do QE, como o FDMNES.

## 6 Conclusão

Neste trabalho de conclusão de curso descreveu-se os princípios e processos do Design de Interação. Também foram explicados vários conceitos da física quântica relacionados ao cálculo computacional da temperatura crítica de supercondutividade.

Realizou-se uma análise dos princípios de usabilidade para softwares na área de pesquisa científica, além de várias entrevistas com pesquisadores. Essas atividades embasaram um projeto de interação com usuários, cujo objetivo foi facilitar e tornar mais eficiente a preparação de simulações de propriedades de materiais supercondutores. Esse projeto tem perspectivas de ser implementado e disponibilizado como uma ferramenta de código aberto para toda a comunidade de pesquisa em supercondutividade. Essa solução representaria a primeira iniciativa de interface gráfica para o cálculo de  $T_c$ .

Alguns desafios da execução deste trabalho foram a compreensão dos conceitos de física quântica e processos envolvidos nos cálculos das propriedades de materiais supercondutores. Nessa etapa de empatia com o usuário, conhecimentos das disciplinas Geometria Analítica, Álgebra Linear, Física II, Variáveis Complexas, Ondas e Linhas, Materiais Elétricos, Ciência dos Materiais e Análise de Sinais e Sistemas foram fundamentais. No desenvolvimento da solução de software, utilizou-se conhecimentos das disciplinas de Introdução à Ciência da Computação, Técnicas de Computação e Informática Industrial.

Este trabalho de conclusão de curso demandou diversos conhecimentos das disciplinas da graduação. Além disso, também permitiu o desenvolvimento de habilidades complementares a formação curricular, como a aquisição de conhecimento de diversos princípios e ferramentas de desenvolvimento de software, habilidades de trabalho em equipe e comunicação com diferentes áreas do conhecimento.

# Referências

- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical review*, APS, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957. Citado na página 20.
- BI, T. et al. The search for superconductivity in high pressure hydrides. *arXiv preprint arXiv:1806.00163*, 2018. Citado na página 18.
- DROZDOV, A. et al. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 525, n. 7567, p. 73–76, 2015. Citado na página 12.
- GEBALLE, Z. M. et al. Synthesis and stability of lanthanum superhydrides. *Angewandte Chemie*, Wiley Online Library, v. 130, n. 3, p. 696–700, 2018. Citado na página 12.
- GIANNOZZI, P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with quantum espresso. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 29, n. 46, p. 465901, 2017. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/29/i=46/a=465901>>. Citado na página 19.
- HAFNER, J.; WOLVERTON, C.; CEDER, G. Toward computational materials design: the impact of density functional theory on materials research. *MRS bulletin*, Cambridge University Press, v. 31, n. 9, p. 659–668, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, APS, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964. Citado na página 19.
- KANEKO, U. F. *Somando Estruturas Cristalinas e Interações Magnéticas em Perovskitas com Espectroscopia Raman*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012. Citado na página 20.
- LIU, H. et al. Potential high-*t<sub>c</sub>* superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 114, n. 27, p. 6990–6995, 2017. Citado na página 12.
- MCMILLAN, W. Transition temperature of strong-coupled superconductors. *Physical Review*, APS, v. 167, n. 2, p. 331, 1968. Citado na página 21.
- NIELSEN, J. Enhancing the explanatory power of usability heuristics. In: *Proceedings of the SIGCHI conference on Human Factors in Computing Systems*. [S.l.]: Association for Computing Machinery, New York, NY, United States, 1994. p. 152–158. Citado na página 16.
- POTTERTON, E. et al. A graphical user interface to the ccp4 program suite. *Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography*, International Union of Crystallography, v. 59, n. 7, p. 1131–1137, 2003. Citado na página 24.
- POTTERTON, L. et al. Ccp4i2: the new graphical user interface to the ccp4 program suite. *Acta Crystallographica Section D: Structural Biology*, International Union of Crystallography, v. 74, n. 2, p. 68–84, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 24, 25 e 26.

---

SILVA, C. P. da. *Computação de Alto Desempenho com Placas Gráficas para acelerar o Processamento da Teoria do Funcional da Densidade*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2010. Citado na página 20.

SOMAYAZULU, M. et al. Evidence for superconductivity above 260 k in lanthanum superhydride at megabar pressures. *Physical review letters*, APS, v. 122, n. 2, p. 027001, 2019. Citado na página 12.