

Testausdokumentti: elektronirakenteen
optimointi atomiorbitaalittomaan
tiheysfunktionaaliteorian avulla

Markus KAUKONEN

15. kesäkuuta 2014

email: markus.kaukonen@iki.fi, opiskelijanumero: 010974524

1 Mitä on testattu, miten tämä tehtiin

Tehtiin unit testit kaikille funktioille. **Nyt kuitenkin valmiina vain energialaskuihin liittyvät testit.** Testaus toteutettiin Pythonin unittest moduulilla. Sen dokumentaatio on osoitteessa: <https://docs.python.org/2/library/unittest.html#type-specific-methods>.

Yksikkötestit ajetaan suorittamalla ohjelma './testaa_energiat.py' hakemistossa 'TiraLabra/Tiralabra/python_unit_tests'.

2 Minkälaisilla syötteillä testaus tehtiin (vertailupainotteisissa töissä tärkätä)

Testeissä käytettiin 2-dimensionaalista dataa joka luettiin tiedosta 'alkuarvot.txt_5x5x0'.

3 Miten testit voidaan toistaa

Testit voidaan toistaa ajamalla komento './testaa_energiat.py' hakemistossa 'TiraLabra/Tiralabra/python_unit_tests'.

4 Ohjelman toiminnan empiirisen testauksen tulosten esittäminen graafisessa muodossa.

Voidaan vaihdella atomiytimien paikkoja tai lisätä niitä tai muuttaa niiden varausta ja katsoa että tulokset on kvalitatiivisesti ok. **tähän muutama kuva demoamaan.**