

Testausdokumentti: elektronirakenteen  
optimointi atomiorbitaalittomaan  
tiheysfunktionaaliteorian avulla

Markus KAUKONEN

21. kesäkuuta 2014

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

## 1 Mitä on testattu, miten tämä tehtiin

Tehtiin unit testit kaikille tärkeimmille funktioille jotka ovat paketeissa energia.py ja gridi.py (muissa paketeissa on minimointirutiinija jotka ovat opettavaisia tässä työssä mutta jotka kannattaa korvata scipy:n minimointialgoritmeilla. Testaus toteutettiin Pythonin unittest modulilla. Sen dokumentaatio on osoitteessa: <https://docs.python.org/2/library/unittest.html#type-specific-methods>.

Yksikkötestit ajetaan suorittamalla ohjelmat './testaa\_energiat.py' ja 'testaa\_gridi.py' hakemistossa 'TiraLabra/Tiralabra/python\_unit\_tests'.

## 2 Minkälaisilla syötteillä testaus tehtiin (vertailupainotteisissa töissä tärkeätä)

Testeissä käytettiin 2-dimensionaalista dataa joka luettiin tiedosta 'alkuarvot.txt\_5x5x0'. Siinä on mahdollisimman pieni 2d-laskentagridi (3x3 sisäpistettä) ja yksi +1|e| varauksinen ydin gridin kohdassa (2,2).

## 3 Miten testit voidaan toistaa

Testit voidaan toistaa ajamalla komento './testaa\_energiat.py' ja 'testaa\_gridi.py',hakemistossa 'TiraLabra/Tiralabra/python\_unit\_tests'.

## 4 Ohjelman toiminnan empiirisen testauksen tulosten esittäminen graafisessa muodossa.

Ohjelman tuottamat elektronitiheydet ovat kvalitatiivisesti oikeita, koska elektronitiheys keskittyy positiivisten ytimien ympärille. Tarkempaa vertailua olisi voinut tehdä laskemalla systeemien välisiä energiaeroja (esimerkiksi paljonko voitetaan energiassa kun tuodaan +1|e| ydin systeemiin. Tätä energiaeroa olisi voinut verrata muiden kvanttikemiallisten ohjelmien tuloksiin. Esimerkiksi hyvä vertailu ohjelma olisi GPAW (<https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw>), jossa voidaan tehdä pistemäisiä pseudopotentiaaleja, jotka ovat siis samanlaisia kuin tässä työssä käytetyt pistevaraukset.