

Käyttöohje: elektronirakenteen optimointi
atomiorbitaalittomaan tiheysfunktionaaliteorian
avulla

Markus KAUKONEN

21. kesäkuuta 2014

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

1 Käyttöohje

Ohjelmaa vaatii toimiakseen pythonin, uudehkon scipy: ja numpy:n sekä matplotlibin (<http://www.scipy.org/>).

Testiversion voi käynnistää hakemistosta 'TiraLabra/Tiralabra/test' komennolla '..\src\vertaile_nopeuksia.py'. Toteutusdokumentissä esitetyt tulokset on saatu ajamalla tuo ohjelma.

Ohjelma lukee syötteet tiedostoista 'alkuarvot.txt_5x5x0', 'alkuarvot.txt_10x10x0' ja 'alkuarvot.txt_16x16x0'. Esimerkiksi 'alkuarvot.txt_10x10x0' näyttää seuraavalta:

```
1e4      #mylambda
1e6      #SD or MC max iter
1e-2     #tolerance for energy convergence
100.0    #temperature [K] for MC
1e-4     #density chance for functional gradient (SD only)
1e-1     #density chance for MC
0.01     #initial step for line minimization in SD
10       #number of grid points in x
10       #number of grid points in y
0        #number of grid points in z (0==2d case, no this dimension)
4.0      #total electron charge (always positive)
3        #number of nuclei
2 2 0 1.0 #grid positin of a nucleus and its charge (always positive)
2 4 0 1.0 #grid positin of a nucleus and its charge (always positive)
8 7 0 2.0 #grid positin of a nucleus and its charge (always positive)
```

Ohjelma tuottaa matplotlib kuvan konvergoituneesta elektronitiheydestä.

2 Javadocia vastaava dokumentaatio

Javadocia vastaava dokumentaatio on toteutettu Sphinx:illä. Se käynnistyy selaimella esim. komennolla 'firefox TiraLabra/Docs/html/index.html'