

Peacemaker - To Do

Anmeldung
Matrabit



Vorsatz für
Titel

- ✓ ☒ • Build System Make → Meson
- ✓ ☒ • Input Einlesen / Speichern Linked List → Toml
 - () - Fehlercatcher anpassen
 - ✓ ☒ - Code aufräumen : Linked List und damit verknüpfte Subroutines, ... entfernen
- ✓ ☒ • Unit Tests
 - () - Setup für unit Tests einbauen
 - Framework : Test-drive (Wurde von Grimmer in XTB benutzt)
 - Problem: Peacemaker besteht nicht aus units
 - Funktionen und Subroutines hängen nicht nur von ihren Inputvariablen ab, sondern auch von Variablen, die im gesamten Code zugänglich sind.
 - ⇒ Sehr schwierig sinnvolle Unit Tests zu schreiben.
 - ⇒ Pure Functions generieren durch Anpassen von Input
 - ✓ ☒ - Unit Tests schreiben
 - ✓ → cluster.f90 : process_coordinates_recolol ⇒ Berechnung von moments of inertia
 - ✓ → partition_functions.f90
 - ✓ → qce.f90
 - ✓ → polynomial.f90
 - ✓ → thermo.f90 ✓ → auxiliary.f90
- ☐ • Übersichtsdiagramm vom gesamten Code
 - () - Doktorarbeiten von Michael von Domaros und Johannes Ingumey
 - () - Teildiagramme
 - () → Sinnvoll zusammenfügen
- ☐ • Python scripts von Johannes und convert (old → Toml) sinnvoll bereitstellen
 - () - Codes nachvollziehen und ggf. verbessern
- ✓ ☒ Update print-citation
 - ✓ • Multicomponent paps
 - ✓ • Ist das dritte Paper in "always cit" richtig? → Ja : implementation of QCE
- ☐ Update README

Partition Functions

- Check ob amt immer richtig übergeben wird (precision → sehr klein $\sim 10^{-48}$)
- Check ob $V_{\text{vib}} \cdot b_{\text{vib}} \leq 0$: Probleme in calculate_dlnqtran
- Temp abhängigkeit von amt

Wochenplaner

Mo	04.03.24	<ul style="list-style-type: none">• Setup für Unit Tests eingebaut : Test-drive → reines Fortran framework, Dependency im Subproject Ordner, keine extra Installation von zusätzlicher Software nötig, wird automatisch von Neron mit gebaut.Problem : Peacemaker besteht nicht auf Unit → Global data als Input	Mo	15.04.24	Tests : qce.f90 downhill_simpler thermo.f90 cp,cv								
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										
Mo	11.03.24	Tests : Partition Functions ✓ Moment of Inertia ✓ ↳ Subroutines ausgelagert für besserer Nachvollziehbarkeit	Mo	22.04.24									
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										
Mo	18.03.24	Population Polynomial → Verstehen, Testen, nach Alternativen schauen	Mo	29.04.24									
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										
Mo	25.03.24	Urlaub	Mo	06.05.24									
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										
Mo	01.04.24	Update : print_citation_info, print_welcome_info • Tests : • calculat_remaining_populations() ✓ → Es kann passieren, dass die Population so groß wird, dass sie nicht verarbeitet werden kann (ab 1×10^{10}). ⇒ Warnung eingebaut (gleiches für partition-functions) • solve_polynomial3 → für Volume Polynomial ↳ fails wenn $a_3 = 0$ oder $a_2 = 0 \wedge a_1 = 0$ • Optimizer Input geändert von <table><tr><td>Start</td><td>1</td></tr><tr><td>Stop</td><td>10</td></tr><tr><td>Start temp</td><td>100</td></tr><tr><td>Stop temp</td><td>1000</td></tr></table> zu ✓ optimize = ["amt", "amt-temp", "bxv", "bxv-temp"] ↳ Was optimiert werden soll in beliebiger Reihenfolge • optimize im code von intep zu array aus logicals in der Reihenfolge (amt, bxv, amt-temp, bxv-temp) geändert → Code Änderungen in input.f90, qce.f90, downhill_simpler, thermo.f90, shared_data.f90 Kürzer und übersichtlicher TODO von Johannes? in qce.f90 → single_qc() gemacht. • Interface mod. wird jetzt aktiviert mit interface_mod = true (wie alle booleans) • Tests : • check_convergence() in qce.f90 ✓ ln_factorize() in auxiliary.f90 ✓ derivative() in auxiliary.f90 ✓ • check eingebaut : bxv-Voxel >= vol → unphysikalisch, Problem mit Berechnung von ln(gamma) → ln(vol - bxv-Voxel)	Start	1	Stop	10	Start temp	100	Stop temp	1000	Mo	13.05.24	
Start	1												
Stop	10												
Start temp	100												
Stop temp	1000												
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										
Mo	08.04.24 Semesterstart		Mo	20.05.24									
Di			Di										
Mi			Mi										
Do			Do										
Fr			Fr										
Sa, So			Sa, So										

Mo	27.05.24		Mo	08.07.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	03.06.24		Mo	15.07.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	10.06.24		Mo	22.07.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	17.06.24		Mo	29.07.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	24.06.24		Mo	05.08.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	01.07.24		Mo	12.08.24
Di			Di	
Mi			Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	

Fragen an Johannes:

- Texcode Manual
- Wofür ist das Interface?
 - Github PM3
 - Um einen externen optimizer von scipy zu benutzen
 - PM und Python integrieren indirect über files
 - Daten für amt, brv... (file) → single point (PM) → speichern in file → optimizer nimmt das (scipy)
 - ist Fehler
 - Python script: pymake2
- Ist es korrekt C_v zu berechnen obwohl V nicht konstant ist?
 - Nein! → und C_p müsste numerisch berechnet werden (Wird momentan aus C_v berechnet)
- Ideen was noch gemacht werden kann
 - Downhill simplex ist gut wenn man nur amt und brv optimieren möchte
 - Nur ein Minimum
 - ABER: nicht so gut für die Optimierung von allen 4 Parametern weil der Algorithmus Problem mit flachen Regionen hat.
 - Es gibt sehr viele lokale Minima. → sehr unterschiedliche Ergebnisse je nach Startpunkt.
 - ⇒ Besser Optimierer? Aber es ist nicht sicher wie sinnvoll die Temperaturabhängigkeiten für amt und brv sind.
 - ↳ nur begrenzt sinnvoll
 - Wenn, dann differentielle Methoden - vielleicht besser mit Python verknüpfen als die aktuelle Lösung mit dem Interface
 - Es wäre schön, wenn es möglich wäre ein System zu berechnen, bei dem die Temperatur konstant ist und der Druck sich verändert. Bisher nur mit konstantem Druck und Temperatur-rangern möglich.
 - Mean field energy (intr cluster interaction) skaliert im Moment mit der Clustergröße
 - Vielleicht ist es sinnvoll die solvent accessible surface zu nehmen.
 - Wie kommt man da dran?
 - ↳ Skript schreiben
 - (Sehr aufwendig) Eine andere Grundlage als die VDW Gleichung für die Rechnungen
 - ↳ Traue ich mir nicht zu!