

Peacemaker - To Do

- ✓ ☒ • 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_recol → Berechnung von moments of inertia
 - ✓ ☒ → partition_functions.f90
 - qce.f90
 - ✓ ☒ → polynomial.f90
 - thermo.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 developer team
- ☐ Update README

Partition Functions

- Check ob amt immer richtig übergeben wird (precision → sehr klein $\sim 10^{-48}$)
- Check ob $V - V_{\text{ext}} \cdot b_{\text{xy}} \leq 0$: Probleme in calculate_dlnqtran
- Temp abhängigkeit von amt und bxy
- Kann q_{rot} negativ sein? → $\ln(q_{\text{rot}})$ ja! ✓

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 Meson mit gebaut.Problem: Peacemaker besteht nicht auf Unit→ Global data als Input	Mo	15.04.24								
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: • calculate_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 $a_2 = 0 \wedge a_1 = 0$	Mo	13.05.24								
Di			Di									
Mi			Mi									
Do			Do									
Fr			Fr									
Sa, So			Sa, So									
Mo	08.04.24 Semesterstart	• Optimizer Input geändert von <table border="1"><tr><td>Real</td><td>1</td></tr><tr><td>Int</td><td>10</td></tr><tr><td>Real Temp</td><td>100</td></tr><tr><td>Real Temp</td><td>1000</td></tr></table> zu ✓ optimize = ["amf", "amf-temp", "brv", "brv-temp"] ↳ Was optimiert werden soll in beliebiger Reihenfolge • optimize im code von intps zu array aus logicals in der Reihenfolge (amf, brv, amf-temp, brv-temp) geändert → Code Änderungen in input.f30, qee.f30, shared_data.f30 Kürzer und übersichtlicher TODO von Johannes? in qee.f30 → single_qee() gemacht. • Interface mod. wird jetzt aktiviert mit interface_mod = true (wie alle booleans) ✓	Real	1	Int	10	Real Temp	100	Real Temp	1000	Mo	20.05.24
Real	1											
Int	10											
Real Temp	100											
Real Temp	1000											
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	