

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.fs0 : process_coordinates_recolol ⇒ Berechnung von moments of inertia
 - ✓ → partition_functions.fs0
 - qee.fs0
 - polynomial.fs0
 - thermo.fs0
- ☐ • 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

Partition Functions

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

Wochenplaner

Mo	04.03.24	• 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.	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		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		Mo	13.05.24
Di			Di	
Mi		Semesterstart	Mi	
Do			Do	
Fr			Fr	
Sa, So			Sa, So	
Mo	08.04.24		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	