

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
1	Einleitung	1
1.1	Anwendungsszenarien von NuT	2
1.2	Weitere allgemeine Anmerkungen	3
2	AP1 – Ausbau und Verbesserung der Parallelisierungs- und Funktionsmächtigkeit innerhalb des Numerical Toolkit	5
2.1	Untersuchungen zur Einbringung von OpenMP in NuT	5
2.1.1	Test und Resultate	6
2.1.2	Schlussfolgerung	10
2.2	Weitere Optionen zur Prädiktionierung iterativer Verfahren	10
2.3	Umschreiben des Numerical Toolkit-Codes von FORTRAN nach C++ ...	12
3	AP2 – Verbesserung und Ausbau der Zusammenarbeit von ATHLET mit dem Numerical Toolkit	17
3.1	Aufbau eines Doppelpuffers zur effizienteren Nutzung des ATHLET/NuT-Kommunikationskanals	17
3.2	Entwicklung einer effizienten Dimensionierungsstrategie zu den linearen Gleichungssystemen	19
3.2.1	Effiziente lineare Algebra	19
3.2.2	TOP-basierte Dimensionierungsstrategie	20
3.3	Nutzung von NuT zur Behandlung der linearen Algebra während der Startrechnung	23
3.4	Weiterentwicklung und Ausbau der Differentialgleichungsnumerik im Numerical Toolkit	25
3.4.1	ATHLET-spezifische Anforderungen an die Zeitintegration	25
3.4.2	Der FiterRK-Ansatz	28
3.4.3	Anforderung an die technische Umsetzung	34
3.5	Einbringen der Kommunikations-Bibliothek MMA	35
3.5.1	Einbinden von MMA	36
3.5.2	Funktionsweise von MMA	37
3.6	Speichern und Laden der Jacobimatrix im Restart-Szenario mittels NuT	40

4	AP3 – Aktualisierung der DGL-Numerik in der AC²-Komponente COCOSYS	45
4.1	Analyse des Ist-Zustandes der Differentialgleichungnumerik im Thermo- hydraulik-Modul von COCOSYS	45
4.2	Zugang von COCOSYS zur AC ² -einheitlichen Handhabung der DGL- Numerik über die NuT-Architektur	47
4.2.1	Funktionsbasierte Modifikationen am Code des Thermohydraulik-Moduls	47
4.2.2	Funktionsbasierte Modifikationen des anwendungsseitigen NuT-Codes .	50
4.2.3	Ausstehendes Bindeglied	51
4.3	Ausarbeitung einer Kommunikations- und Parallelitätsstrategie im Ar- beitsverbund der AC ² -Komponenten COCOSYS und ATHLET mit dem Numerical Toolkit	52
5	AP4 – Validierung der Modifikationen	55
5.1	Release und QS zu NuT 1.0	55
5.2	Kohärenz-Test zur Berechnung der Jacobimatrix.....	56
5.2.1	Motivation	57
5.2.2	Mögliche Auswirkungen einer Kohärenz-Diskrepanz	57
5.2.3	Funktionsweise und Anwendungsbereich des Kohärenz-Tests	61
5.2.4	Empfehlungen zum Einsatz des Tests	61
5.3	Entwicklung dedizierter Programme zum Austesten einzelner Funktio- nalitäten	62
6	Fazit und Ausblick	63
	Literaturverzeichnis	65
	Abbildungsverzeichnis	70
	Tabellenverzeichnis	71
	Verzeichnis von Codeabschnitten.....	72
A	Anhang	73
A.1	Masterarbeit Ravil Dorozhinskii	73
A.1.1	Effiziente lineare Algebra	73
A.1.2	Implementation eines Doppelpuffers	73
A.1.3	Betreuung	73