

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	VI
Tabellenverzeichnis	VII
1 Einleitung	1
1.1 Automatische Validierung	1
1.2 Motivation	3
2 Grundlagen	5
2.1 Kernfusion	5
2.1.1 Kernfusion als Energiequelle	7
2.1.2 Experimentelle Kernfusion	7
2.1.3 Kernfusionsforschung am Forschungszentrum Jülich	10
2.2 Eingesetzte Supercomputer	11
2.2.1 IBM Power6 575 Cluster - JUMP	11
2.2.2 JuRoPa/HPC-FF	12
2.2.2.1 Juropa-JSC	12
2.2.2.2 HPC-FF	13
2.2.2.3 Gesamtsystem	13
2.3 Programmbeschreibung des ERO-Codes	14
2.3.1 Eingabedaten	17
2.3.2 Programmablauf	18
2.4 Besonderheiten der Monte-Carlo-Simulation	19
2.4.1 Das Monte-Carlo-Modell	19
2.4.2 Deterministische und nicht-deterministische Simulation	20
2.5 OpenMP	22
3 Das AVS	25
3.1 JuBE	25
3.1.1 Aufgaben von JuBE	25
3.1.1.1 Das Top-Level XML File	26
3.1.1.2 Kompilierung	28
3.1.1.3 Vorbereitung	29
3.1.1.4 Ausführung	29

Inhaltsverzeichnis

3.1.1.5	Analyse	30
3.1.2	Gesamtsystem	31
3.2	ERO Testing Tool	32
3.2.1	Konfiguration	32
3.2.2	Behandlung von Volumen-Daten	34
3.2.2.1	Charakteristische Werte der Volumen-Daten	35
3.2.2.2	Berechnung der mittleren Eindringtiefe	37
3.2.3	Behandlung von Oberflächendaten	42
3.2.4	Programmablaufplan	43
3.2.5	Testreport und Benachrichtigung des Benutzers	44
3.3	Verarbeitung	45
3.4	Grundkonfiguration und Referenzfälle	46
3.4.1	PISCES-B	46
3.4.2	Höhere Kohlenwasserstoffe	47
3.4.3	ERO-SDTrimSP Kopplung	48
4	Verwendung des AVS	51
4.1	Fallbeschreibung von Case 6	51
4.2	Validierung	54
4.2.1	Beispiel einer fehlgeschlagenen Validierung	56
4.2.2	Beispiel einer erfolgreichen Validierung	58
4.2.3	Speedup der Parallelisierung	59
5	Zusammenfassung und Ausblick	61
5.1	Zusammenfassung	61
5.2	Ausblick	62
	Literaturverzeichnis	VIII
A	Testreports	XI