

## Testverslag domein decompositie met horizontale en verticale verfijning

*Technisch Rapport* TR03-03

*Datum*

29 augustus 2003

*Auteur(s)*

dr.ir. E.A.H. Vollebregt  
dr.ir. B. van 't Hof  
drs. C. van Velzen

*In opdracht van*

Rijkswaterstaat/RIKZ (overeenkomst RKZ-1260)

# Samenvatting

In het kader van contract RKZ-1260 heeft VORtech Computing een nieuwe versie van WA-QUA/TRIWAQ met domein decompositie gerealiseerd. Met deze versie kunnen gebruikers voor het eerst in een enkele simulatie zowel horizontale als verticale verfijning gebruiken (DDH+V). Om dit mogelijk te maken is de programmatuur intern gereorganiseerd; de aanpak voor verticale verfijning is gelijkgetrokken met die voor horizontale verfijning, in de rekenroutines en in de communicatiebibliotheek, en op diverse punten zijn structurele verbeteringen geïntroduceerd.

Om te verifiëren dat de nieuwe programmatuur goed functioneert is een groot aantal testen uitgevoerd. In dit verslag wordt een overzicht gegeven van de daarbij verkregen testresultaten.

Een samenvatting van de resultaten is dat simulatieresultaten van alle simulaties (ook sequentiëel) licht veranderen door diverse aanpassingen in de rekenroutines, dat de performance van TRIWAQ 15% *beter* is geworden door de introductie van een nieuwe “loop-structuur”, en dat de functionele verbeteringen en uitbreidingen naar behoren zijn geïmplementeerd.

# Inhoudsopgave

<b>Samenvatting</b>	<b>2</b>
<b>1 Inleiding</b>	<b>4</b>
<b>2 Testen met de bestaande functionaliteit</b>	<b>5</b>
2.1 Sequentiële en parallelle simulaties . . . . .	5
2.2 Testen met verticale verfijning . . . . .	6
2.3 Restarten van DDVERT simulaties . . . . .	6
2.4 Testen met horizontale verfijning . . . . .	7
2.5 Speciale testen voor COEXEC . . . . .	8
<b>3 Testen met nieuwe functionaliteit</b>	<b>10</b>
3.1 Simulaties met verticale verfijningen via meerdere domeinen . . . . .	10
3.2 Gebruik maken van horizontale en verticale verfijningen tegelijk . . . . .	11
3.3 Restarten van DDHOR simulaties . . . . .	11
3.4 Testen van Nikuradse areas op DDHOR-interfaces . . . . .	12
3.5 Testen van tijdsafhankelijke maskers . . . . .	12
<b>4 Conclusies</b>	<b>13</b>
<b>Referenties</b>	<b>15</b>

# Hoofdstuk 1

## Inleiding

In het kader van contract RKZ-1260 heeft VORtech Computing een nieuwe versie van WAQUA/TRIWAQ met domein decompositie gerealiseerd. Met deze versie kunnen gebruikers voor het eerst in een enkele simulatie zowel horizontale als verticale verfijning gebruiken (DDH+V). Om dit mogelijk te maken is de programmatuur intern gereorganiseerd; de aanpak voor verticale verfijning is gelijkgetrokken met die voor horizontale verfijning, in de rekenroutines en in de communicatiebibliotheek, en op diverse punten zijn structurele verbeteringen geïntroduceerd.

Voor het testen van de correctheid van de opgeleverde programmatuur zijn een groot aantal testen uitgevoerd. Dit rapport geeft een beschrijving van de uitgevoerde testen en van de bijbehorende resultaten.

De testen zijn onderverdeeld in drie groepen. Hoofdstuk 2 bespreekt de simulatieresultaten van testen met de bestaande functionaliteit: sequentiële en parallelle sommen, en simulaties met DDVERT en DDHOR. In Hoofdstuk 3 worden de testen van de nieuwe functionaliteit besproken: simulaties met zowel horizontale als verticale verfijning, DDVERT-sommen die via het nieuwe mechanisme worden uitgevoerd, en de restart-functionaliteit voor DDHOR-berekeningen. Vervolgens worden de uitkomsten van de testen samengevat in de conclusies in Hoofdstuk 4.

## Hoofdstuk 2

# Testen met de bestaande functionaliteit

### 2.1 Sequentiële en parallelle simulaties

De volgende set van modellen is gebruikt om na te gaan of sequentiële en parallelle simulaties nog correct verlopen.

- csm8\_trm: het CSM8 model met TRIWAQ met 2 lagen
- csm8\_wq : het CSM8 model met WAQUA
- ijssel: rivier model van (deel van) de ijssel (WAQUA)
- ijsselmeer: model van het ijsselmeer (WAQUA)
- moha\_wq: model van de Haringvliet (WAQUA model)
- jaapmoha: model van de Haringvliet (TRIWAQ)
- lek : rivier model van (deel van) de lek (WAQUA)

Elk model is op 5 verschillende manieren gedraaid:

1. sequentieel met de standaard versie (sold)
2. sequentieel met de nieuwe versie (snew)
3. parallel met de standaard versie (pold)
4. parallel met de nieuwe versie (pnew)
5. sequentieel met de nieuwe versie (srnd) met de optie QUANTF\_RANDOM

Vervolgens zijn de resultaten van sold met snew vergeleken en pold met pnw. Het verschil tussen snew en srnd geeft inzicht in de orde van verschillen die het gevolg zijn van afrondfouten. De gevonden verschillen zijn voor alle modellen in de orde van of kleiner dan die tussen snew en srnd.

Voor de runs met de CSM8-modellen is even naar de performance gekeken. Voor WAQUA duurde een simulatie van vier dagen op een 2GHz Linux PC met de SIMONA exportversie 2003-01 ongeveer 70 seconden, en met de nieuwe DDH+V ook. Een TRIWAQ-simulatie van twee dagen kostte respectievelijk 81 en 71 seconden. Dit betekent behoud van de performance voor WAQUA en een snelheidswinst van zo'n 15% voor TRIWAQ. Deze is voornamelijk behaald door de introductie van de nieuwe loop-structuren in de rekenroutines.

## 2.2 Testen met verticale verfijning

Er is getest of de al bestaande DDVERT functionaliteit behouden is gebleven bij het integreren van combinatie van DDHOR en DDVERT functionaliteit. Hiervoor zijn twee modellen gebruikt:

- bakken model: eenvoudig model van een riviermonding waarbij een eiland midden op een van de DDVERT interfaces ligt (sigma-vast koppelingen)
- bakje model: model van een kanaal (sigma-sigma koppelingen)

In de nieuwe versie DDH+V is een aanpassing gemaakt m.b.t. tot het "ownership" van de snelheidspunten op de interface. In de standaard versie horen de snelheidspunten altijd bij het linker/ondergelegen subdomein. In de nieuwe versie zijn deze punten echter van het fijnste subdomein. Hierdoor geven modellen waarbij een grof domein links van een fijn domein ligt iets andere resultaten.

Het bakken model heeft drie deeldomeinen die achter elkaar liggen. Het model is met twee verschillende laagverdelingen gedraaid met de standaard versie van SIMONA en met de nieuwe code (de deeldomeinen zijn van links naar rechts genummerd):

- dom1: kmax=4, dom2: kmax=1 en dom3: kmax=3 (=oorspronkelijke bakken model) Hierbij ontstaan zoals verwacht verschillen op de interface tussen het tweede en derde domein. De verschillen in waterstand zijn in de orde van een millimeter.
- dom1: kmax=4, dom2: kmax=2 en dom3: kmax=1. Hierbij zijn de gevonden verschillen in de orde van afrondfouten ( $10^{-6}$  meter in de waterstanden).

Het bakje-model vertoont precies het zelfde gedrag als het bakken model.

## 2.3 Restarten van DDVERT simulaties

Er is nagegaan of een restart van een DDVERT simulatie nog correct verloopt. Extra lastig hierbij is dat WAQPRE moet interpoleren om de restart goed uit te kunnen voeren. Voor

de restart is het bakje model gebruikt. Het bakje model bestaat uit drie subdomeinen. De restart is getest met de volgende waarden van  $k_{max}$  (van links naar rechts) 5,3,1 en 5,1,3. De eerste test gaf verschillen in de orde van afrondfouten. De tweede test gaf echter verschillen in de orde van een millimeter, die ontstaan op de interface tussen het domein met 1 en 3 lagen. De oorzaak hiervan is nog niet bekend.

## 2.4 Testen met horizontale verfijning

Als onderdeel van de ontwikkeling van de DDHOR-functionaliteit is een DDHOR-testbank [1] geconstrueerd. Deze bevat uit twaalf verzamelingen van simulaties, die ieder uit ongeveer tien simulaties bestaan. Uit deze 120 simulaties zijn er bij de opname van DDHOR in beheer en onderhoud veertien gekozen, waarmee een groot aantal mogelijkheden van de programmatuur wordt getest.

Deze veertien testen zijn uitgevoerd, waarbij de uitvoer werd vergeleken met die van de standaard SIMONA-programmatuur (export 2003-01). De verschillen tussen de uitkomsten van de nieuwe programmatuur en de standaard SIMONA-programmatuur waren doorgaans zeer klein (minder dan 1mm voor de waterstand,  $0.001\text{kg}/\text{m}^3$  voor concentraties, of  $1\text{mm}/\text{s}$  voor stroomsnelheden). Grotere verschillen traden op in de volgende gevallen:

**test 2** In deze simulatie komen schuine randen voor, omdat het kanaal dat gesimuleerd wordt, een hoek van  $45^\circ$  maakt met het rooster. Het blijkt dat de standaard SIMONA-programmatuur voor deze simulatie geen correcte resultaten produceert. Daarom zijn de resultaten vergeleken met die van de versie die als uitgangsversie heeft gediend voor de nieuwe programmatuur: de test-versie DDHOR. Nu waren de verschillen wel heel klein, behalve de stroomsnelheden op de interface zelf (zie het laatste punt in deze opsomming).

**test 3a/b** In deze simulatie treedt veel droogval op. Omdat de koppelingen in het geval van droogval aangepast zijn in de nieuwe versie, treden er verschillen op tot  $3\text{ cm}$  in de waterstand,  $0.2\text{ m}/\text{s}$  in de stroomsnelheid en  $6\text{ kg}/\text{m}^3$  in de concentratie. Nadere inspectie wijst echter uit dat deze verschillen inderdaad met droogval samenhangen en slechts tijdelijke en locale effecten zijn.

**test 4** Dit model is bedoeld om te onderzoeken of er geen massa verloren gaat. In de simulatie gaat het water wild stromen, wat de oplossing nogal gevoelig maakt. Er treden verschillen op van  $7\text{ cm}$  in de waterstand en  $17\text{ cm}/\text{s}$  in de stroomsnelheid.

**test 9** In deze simulatie lopen de verschillen iets hoger op, tot  $4\text{ mm}/\text{s}$  in de stroomsnelheid.

**test 10** In deze simulatie lopen de verschillen iets hoger op, tot  $5\text{ mm}$  in de waterstand. Dit verschil houdt verband met droogval.

**test 11** In de standaard-SIMONA versie zit een fout in de aanroep van de routine `trslav` vanuit `trssuw`. Deze is verholpen, wat een verschil in de uitvoer veroorzaakt.

**test 2, 3a, 4, 6, 7, 8, 9, 10** Een aanpassing in de collector COPPOS veroorzaakt grote verschillen in de stroomsnelheid op de interface. In sommige gevallen waren deze stroomsnelheden in de oorspronkelijke programmatuur gelijk aan nul. In de huidige programmatuur komen daar wel de juiste waarden in te staan. Het verschil is dus een gewenste aanpassing.

Een aantal nieuwe onderdelen van de code wordt niet voldoende getest in de al beschreven testen. In de volgende secties worden testen beschreven die uitgevoerd zijn om een correcte werking van de deelsystemen COPPRE, COEXEC, WAQPRO en COPPOS te onderzoeken.

## 2.5 Speciale testen voor COEXEC

De juiste implementatie van het matchen van roosters en van de daarop uitgevoerde controles door COEXEC is getest door de hiervoor gemaakte testen van het project DDHOR uit te voeren. Daarnaast zijn er nieuwe testen gemaakt voor de controles van COEXEC voor DDHOR+VERT berekeningen.

Bij het partitioneren wordt door COPPRE al gecontroleerd of de verticale verfijning is toegestaan. Zo moeten alle lagen van het grove domein doorlopen in het fijne domein. Nu is verticale verfijning ook toegestaan op de globale (DDHOR) domein randen. COEXEC controleert of de gebruikte verticale verfijning op deze randen is toegestaan. Bij elke communicatie moet een domein aangemerkt kunnen worden als het fijnste. Elk subdomein op een globale (DDHOR) rand mag niet vertikaal fijner zijn en horizontaal grover dan een van de subdomeinen aan de andere kant van de rand. Ook dit wordt door COEXEC gecontroleerd.

Er zijn vijf testen gemaakt om te testen of COEXEC de controles correct uitvoert. Hiervoor is een rechthoekig bakje gebruikt dat is opgedeeld in twee globale DDHOR domeinen. Deze domeinen zijn vervolgens opgedeeld in 4 of 6 DDVERT sub domeinen. De volgende laagverdelingen zijn gebruikt afhankelijk van kmax; kmax=2:50% en 50%, kmax=3:25%,50% en 25% en tot slot kmax=4:25%,25%,25% en 25%.

1. Er zijn domeinen die niet als fijnste aangemerkt kunnen worden.

horizontaal rooster:	100X100	300X300
#lagen	4 4	2 2
	4 4	2 2

2. Een partitie die is toegestaan:

horizontaal rooster:	100X100	300X300
#lagen	2 2	4 4
	2 2	4 4

3. Een partitie die is toegestaan. De combinatie kmax=2 en kmax=3 is echter verboden maar deze combinatie komt niet voor op de interface tussen de globale domeinen.



horizontaal rooster:	100X100	300X300
#lagen	2 2	4 3
	2 2	4 3

4. Een partitie die niet is toegestaan. De lagen bij  $k_{\max}=2$  lopen niet door in de lagen van  $k_{\max}=3$ .

horizontaal rooster:	100X100	300X300
#lagen	2 2	3 3
	2 2	4 3

5. Een partitie die om twee redenen niet is toegestaan. Er bestaat een  $k_{\max}=2$  en  $k_{\max}=3$  op een interface (ook al liggen deze niet tegen elkaar aan) en het linker (grover in termen van DDHOR) heeft een subdomein aan de interface met grotere  $k_{\max}=4$  terwijl het fijnere (DDHOR) domein een subdomein aan de interface heeft met  $k_{\max}=3$ .

horizontaal rooster:	100X100	300X300
#lagen	2 2	
		4 4
	4 4	
		3 3
	4 3	

## Hoofdstuk 3

# Testen met nieuwe functionaliteit

Er zijn verschillende testen uitgevoerd om te controleren dat de in het DDH+V project gerealiseerde nieuwe functionaliteit correct functioneert:

1. DDVERT-sommen die via het DDH+V mechanisme worden uitgevoerd;
2. Sommen met zowel horizontale als verticale verfijning;
3. Restart-sommen met DDHOR;
4. Sommen met speciale functionaliteit op DDHOR-interfaces;
5. Testen van de tijdsafhankelijke maskers.

### 3.1 Simulaties met verticale verfijningen via meerdere domeinen

Een type simulatie dat van veel belang kan zijn bij het testen, is de mogelijkheid om DDVERT-simulaties aan de programmatuur aan te bieden alsof het een DDHOR+VERT-som is. Dit wordt gedaan door, in plaats van deeldomeinen van een enkel domein, verschillende domeinen te definiëren, die uit dezelfde *siminp*-file worden verkregen.

Wanneer een DDVERT-simulatie op zo'n manier wordt aangeboden aan de programmatuur, worden alle stadia doorlopen, van het *matchen* van de roosters tot aan het vertikaal interpoleren van data uit onbekende globale domeinen. Toch moeten precies dezelfde resultaten worden gevonden als bij de gewone verwerking, als DDVERT-simulatie.

Er is een zo'n test uitgevoerd:

**test 1c** In beide domeinen werd een roosterafstand van 100m gekozen, maar in het linker domein werden 4 lagen van gelijke dikte gekozen, terwijl er in het rechter domein maar twee werden gekozen. Zo werd feitelijk een DDVERT-berekening uitgevoerd alsof het een DDHOR+VERT-berekening was.

De resultaten kwamen precies overeen met de DDVERT-resultaten (zelfs geen afrondverschillen).

## 3.2 Gebruik maken van horizontale en verticale verfijningen tegelijk

Uit de DDHOR-testbank [1] zijn enkele simulaties gekozen, waarna de laagverdelingen zijn gevarieerd in de verschillende domeinen. Het gaat om de volgende testen:

**test 1c** In het linker domein, met een roosterafstand van 100m, werden 4 lagen van gelijke dikte gebruikt. In het rechter domein, met een roosterafstand van 200m, werden er 2 gebruikt.

De resultaten werden 'op het oog' beoordeeld. Reflecties waren niet waarneembaar.

**test 3c** Een test waarbij veel droogval voorkomt. In het fijn verroosterde domein (het bovenste, met een roosterafstand van 100m), werden vier lagen gekozen, waaronder lagen met een vaste dikte. In het grof verroosterde domein (het onderste, met een roosterafstand van 300m), werd maar een laag gekozen. Hiermee wordt een ander interpolatiemechanisme geactiveerd dan in de vorige test, de zogenaamde 'sigma-vast' koppeling.

Weer werden de resultaten op het oog beoordeeld, en werden er geen onregelmatigheden in de oplossing waargenomen.

**test 10b** Een test met een complexe geometrie werd geconstrueerd, door de grootste van de drie domeinen, domein **links** (roosterafstand 1000m), van test 10 in drie deeldomeinen te verdelen, met 2, 3 en 4 lagen, waaronder steeds ook vaste lagen voorkomen. In de domeinen **reon** (roosterafstand 4000m) en **rebo** (roosterafstand 2000m) worden 1 respectievelijk 2 lagen gekozen.

Weer werden de resultaten op het oog beoordeeld, en werden er geen onregelmatigheden in de oplossing waargenomen.

## 3.3 Restarten van DDHOR simulaties

In de vorige versies van DDHOR was het niet mogelijk om te restarten. Door de invoering van aparte owner tabellen voor s,u,v en d punten is een restart van een DDHOR simulatie wel mogelijk. Dit is getest m.b.v. een kanaal. Met op de interface een k-Nikuradse area. De simulatie is twee maal gedraaid één maal van t=0 tot t=300 waarbij restart informatie op t=150 wordt weggeschreven. vervolgens word een restart gemaakt vanaf t=150 tot t=300. De beide simulaties geven exact de zelfde resultaten.

### 3.4 Testen van Nikuradse areas op DDHOR-interfaces

Door de invoering van aparte index sets voor  $s/u/v/d$ -punten in de LDS-beschrijvingsfile `coplds.waqua` voor COPPRE worden speciale constructies op DDHOR-interfaces beter afgehandeld. Hieronder valt ook de  $k$ -Nikuradse berekening, waar er zogenaamde “areas” precies op de interfaces van domeinen kunnen worden gedefiniëerd. Verder is de Nikuradse berekening in WAQPRO wat aangepast door het verwijderen van redundante berekening.

Er zijn speciale testen met DDHOR uitgevoerd met  $k$ -Nikuradse berekening. Daarvoor is een eenvoudig kanaaltje gemaakt met constante helling en constant debiet, waarbij de waterstand precies parallel aan de bodem moet lopen. Er is invoer gemaakt voor de  $k$ -Nikuradse berekening om precies op de DDHOR-interface de bodem veel stroever te kunnen maken. Nu zijn er vier simulaties uitgevoerd met DDHOR:

1. links grof verroosterd, zonder  $k$ -Nikuradse area op de interface, rechts fijn verroosterd, met Nikuradse areas.
2. links grof, met Nikuradse, rechts fijn, zonder Nikuradse.
3. links fijn, zonder Nikuradse, rechts grof, met Nikuradse.
4. links fijn, met Nikuradse, rechts grof, zonder Nikuradse.

In alle gevallen levert dit de gewenste resultaten: als het fijne domein geen Nikuradse areas bevat dan wordt de Chezy-oplossing gevonden, als dit domein wel een area bevat dan is een knik in de waterstand te zien. Verder is hiermee gecontroleerd dat de  $k$ -Nikuradse berekening per domein afzonderlijk aan- en uitgeschakeld kan worden.

### 3.5 Testen van tijdsafhankelijke maskers

De uitbreidingen van COCLIB en WAQPRO ten aanzien van tijdsafhankelijke maskers zijn uitgebreid meegetest bij alle DDHOR en DDH+V berekeningen, inclusief sommen waarin veel roosterpunten droogvallen en onderlopen gedurende de simulatie.

Verder is geprobeerd de nieuwe functionaliteit apart te testen voor het DDHOR-model voor de haven van Breskens. Deze configuratie “Bres+Scal” was het eerste geval waarin de noodzaak van tijdsafhankelijke maskers aan de orde kwam. In de huidige testen is het echter niet gelukt om een simulatie te vinden die met de oorspronkelijke programmatuur instabiel werd of anderszins artefacten opleverde.

## Hoofdstuk 4

# Conclusies

In het kader van contract RKZ-1260 heeft VORtech Computing een nieuwe versie van WAQUA/TRIWAQ met domein decompositie gerealiseerd, waarmee in een enkele simulatie zowel horizontale als verticale verfijning kunnen worden gebruikt (DDH+V). Dit verslag geeft een overzicht van de testen die zijn gedaan om te verifiëren dat de nieuwe versie van de programmatuur goed functioneert.

De belangrijkste conclusies van de testen zijn als volgt:

- De simulatieresultaten van sequentiële sommen veranderen licht ten opzichte van de huidige standaardversie van WAQUA/TRIWAQ in SIMONA. Dit is het gevolg van een iets andere ordening van de berekeningen die tot een andere opeenstapeling van afrondfouten leidt. Ook is een oud probleem met de afhandeling van debietrandvoorwaarden verholpen.
- De performance van sequentiële sommen met TRIWAQ is licht verbeterd door een nieuwe “loop-structuur” te gebruiken in de rekenroutines. Kleine performance-testjes met CSM8 op een Linux PC laten een snelheidswinst zien van zo’n 15%. Voor WAQUA is de rekensnelheid gelijk gebleven.
- De simulatieresultaten van parallelle sommen veranderen licht door het verwijderen van de zogenaamde redundante berekening. Er is voor een tiental modellen aangetoond dat dit komt door opeenstapeling van afrondverschillen.
- De simulatieresultaten van DDVERT-sommen veranderen enigszins indien er subdomeinranden zijn waar het linker- of onderste deeldomein grover is dan het rechter- of bovenste deeldomein. In dat geval worden de waardes op de interface nu door het andere (fijnste) deeldomein uitgerekend.
- DDVERT-sommen kunnen ook via het DDH+V-mechanisme worden uitgevoerd. Dit vermindert het aantal keer dat WAQPRE en COPPRE worden uitgevoerd in de pre-processing fase. De simulatieresultaten zijn vrijwel gelijk.

- De simulatieresultaten van DDHOR-berekeningen veranderen doordat de gebruikte iteratieve procedure is verbeterd, doordat er bij het interpoleren van waterstanden en zout-concentraties rekening wordt gehouden met droogvallen, en door een paar correcties in de afhandeling van droogvallen nabij subdomeinranden.
- De RESTART en READ\_FROM functionaliteit is nu ook beschikbaar voor DDHOR-berekeningen, en functioneert ook goed als er speciale constructies op subdomeinranden liggen (bijv. k-Nikuradse areas).
- Sommen waarin zowel horizontale als verticale verfijning wordt gebruikt geven een verwacht beeld te zien: er treden slechts beperkte reflecties op op subdomeinranden, en per subdomein lijkt de verkregen oplossing sterk op een oplossing voor dat gebied die wordt verkregen met een uniform rooster met de in dat gebied gebruikte resolutie.

## Bibliografie

- [1] C. van Velzen and B van 't Hof. Testverslag domein decompositie met horizontale verfijning. Technical Report TR01-12, VORtech Computing, Postbus 260, 2600 AG Delft, Nederland, Juli 2001. In opdracht van RIKZ.