

MEMO                      BH/M01.10

Auteur(s)                dr.ir. B. van 't Hof,      dr.ir. E.A.H. Vollebregt

Onderwerp                Voortgangsverslag over Fase 2 van Project RIKZ-951,  
eerste versie domein decompositie met horizontale  
verfijning

In de tweede fase van het project DDHOR-2, "eerste versie domein decompositie met horizontale verfijning" is aan de hand van het detailontwerp uit de eerste fase een programma-versie geïmplementeerd waarmee naast sequentiële en parallelle runs ook domein decompositie runs met horizontale en verticale roosterverfijning kunnen worden uitgevoerd.

De werkzaamheden zijn ongeveer een maand later opgeleverd dan oorspronkelijk verwacht, zoals ook is afgesproken via de contractswijziging van 7 juni j.l. Het uitstel bleek nodig vanwege twee redenen: de complexiteit van de werkzaamheden was groter dan bij het schrijven van de offerte kon worden voorzien, en ons bedrijf heeft een aantal onvoorziene andere werkzaamheden voor het RIKZ uitgevoerd.

Op 29 juni 2001 is een eerste versie van de implementatie opgeleverd aan RIKZ, waarmee fase 2a van dit project werd afgesloten. Sindsdien zijn nog een aantal verbeteringen aangebracht, voornamelijk naar aanleiding van de systeemtesten en het uitbreiden van de testbank.

Op 27 juli zijn de produkten van fase 2b opgeleverd:

- de quick reference guide voor het gebruik van WAQUA/TRIWAQ;
- de users' guide voor de parallelle en domein decompositie functionaliteit van WAQUA en TRIWAQ;
- de programmers' guide van COCLIB, en systeemdokumentatie van COUPLE;
- het rapport TR01-06, een aangepaste versie van het detailontwerp;
- de testbank die is uitgebreid met simulatie van transport en het bijbehorende testrapport TR01-12.

Op 5 augustus zijn nog enkele wijzigingen aan deze documenten opgeleverd. Op 21 augustus zullen de genoemde producten worden besproken in de voortgangsbespreking van fases 2a en 2b.

Inmiddels heeft de programmatuur een groot aantal systeemtesten ondergaan en ook een (kleiner) aantal testen met realistische modellen. Hierbij zijn bepaalde problemen opgetreden en verholpen, waardoor de verwachting is dat de code inmiddels krachtig genoeg is om een groot aantal simulaties tot een goed einde te brengen.

Bij de implementatie en het testen van de DDHOR programmatuur zijn de volgende punten het meeste opgevallen:

- Het mogelijk maken van transport-simulatie in DDHOR berekeningen heeft tot nu toe niet tot tijdstap-restricties geleid. Wel zijn er gelijksoortige complicaties opgetreden ten gevolge van lage doorstroomhoogten nabij koppelingsranden. Voor een geval waarin de transport-solver niet wilde convergeren is een aanpassing gemaakt aan de discretisaties nabij verfijningsranden.
- Bij de koppeling van het detailmodel van de haven van Breskens aan het Scalwest-model trad een interessant probleem op. Droge punten werden in het havenmodel namelijk niet als landpunten weergegeven, maar als tijdelijk droge punten met een zeer hoge bodemligging. Dit veroorzaakte problemen bij de interpolaties. Het probleem is verholpen door deze punten als landpunt aan te merken. Dit heeft tot gevolg dat voor sommige domeinen een aanpassing aan de invoer-file nodig is, voordat ze kunnen worden gekoppeld aan andere domeinen. In de toekomst is het wellicht nuttig dat te voorkomen door ervoor te zorgen dat tijdelijk droge punten niet in de interpolatie worden gebruikt.
- Het blijkt lastig om precies aan te geven welke waarden in veld-arrays door communicatie moeten worden vervangen, en welke waarden in de interpolaties mogen worden gebruikt. Dit uit zich bijvoorbeeld doordat er op verschillende plaatsen in de code aan elkaar verwante masker-arrays worden gebruikt. Het zou goed zijn om over een tijdje hierop te reflecteren, of hier een duidelijkere structuur in is aan te brengen. Daarbij speelt een rol dat de afhandeling van subdomein-randen in parallelle en DDVERT berekeningen net wat anders verloopt dan in DDHOR berekeningen. Ook hier kan mogelijk meer lijn in worden gebracht.
- Ten opzichte van het prototype DDHOR is het aantal rand-codes sterk toegenomen. Bij loops over rijen of kolommen van het rekenrooster moet heel precies worden bijgehouden welke (rand-)punten wel en welke niet in de loop moeten worden opgenomen. Hierbij worden de randcodes *ibitfc*, *ibddvr*, *ibddh1*, *ibddhc* en *ibddhf* gebruikt. Met name bij het gelijktijdig gebruik van DDVERT en DDHOR moet deze loop-structuur goed worden heroverwogen.
- De nieuwe manier van specificeren van te koppelen roosters, via *areas-files* in plaats van *multi-curves*, lijkt vooralsnog voor gebruikers veel eenvoudiger te zijn. Alleen is het voor de gebruiker nog lastig dat hij de zogenaamde “virtuele roosterpunten” aan deeldomeinen toe moet kennen, waarbij met name bij gesloten randen een aantal keuzes niet is toegestaan. Dit kan worden vereenvoudigd door de opgave van *areas-files* door gebruikers te beperken tot interne waterstandspunten, en in de partitioner een zinvolle keuze te maken voor de verdeling van de virtuele punten.
- De communicatie-bibliotheek COCLIB is veel verder uitgebreid dan was voorzien. Er is -voor zover mogelijk binnen de beperkingen van FORTRAN-77- gekozen voor een object-georiënteerde programmeerstijl. Dit is mede noodzakelijk gebleken om de functionaliteit voor verticale en horizontale interpolaties gelijktijdig aan te kunnen bieden.
- Door middel van een groot aantal situaties met WAQUA en TRIWAQ is geverifieerd dat de nieuwe code goed werkt voor sequentiële, parallelle en DDVERT berekeningen. Ook zijn een aantal parallelle sommen via de DDHOR-1:1 koppeling gereproduceerd. Behoudens verschillen ten gevolge van afrondfouten levert dit dezelfde resultaten op als de standaardversie van WAQUA/TRIWAQ. Ook zijn hierbij een paar kleine problemen

in de standaardversie verholpen.

- De resultaten van de testbank, die is ontwikkeld in het kader van het prototype DDHOR (Project RKZ-811), konden worden gereconstrueerd. Bepaalde problemen die optraden bij het prototype, zoals de problemen bij een bron- of putpunt nabij de koppelingsrand, traden niet op bij de nieuwe versie. De reden is niet onderzocht.
- Vanwege de nieuwe functionaliteit in COCLIB zijn de communicaties in de rekenroutines iets duurder geworden, afhankelijk van het aantal processen en hun configuratie tot maximaal 30%. Dit leidt tot maximaal enkele procenten snelheids-verlies voor een complete simulatie.

Op de volgende punten wordt nog gewerkt aan verdere verbetering van de huidige producten:

- De opgeleverde testbank lijkt niet heel kritisch te zijn ten aanzien van transport-simulaties. Op eigen initiatief heeft VORtech Computing besloten ook aan de andere testen van de testbank varianten met stof-transport toe te voegen. Dit heeft inmiddels geleid tot het signaleren van een tweetal complicaties: het hierboven beschreven probleem met lage doorstroomhoogtes, en een complicatie in de droogval-controle in waterstandpunten. Aan het laatste probleem wordt nog gewerkt.
- We hebben gemerkt dat de combinatie van parallel rekenen en DDHOR binnen dezelfde simulatie nog niet goed functioneert. Dit hebben we tot op heden lage prioriteit gegeven omdat het probleem kan worden omzeild ten koste van een langere doorlooptijd, terwijl andere problemen niet zo te omzeilen zijn.
- Op een aantal punten is het detail ontwerp naar onze zin nog niet voldoende in overeenstemming met de huidige implementatie. Hier zullen we zodra andere zaken zijn opgelost nog aandacht aan besteden. Overigens is bij de implementatie gebleken dat het detail ontwerp niet voldoende gedetailleerd is om alle programma-technische complicaties in een vroeg stadium te detecteren of te beschrijven. Het zou goed zijn als er in een ander kader tijd wordt geïnvesteerd om het detail ontwerp verder op te waarderen tot een goede beschrijving van hoe de code werkt, en welke complicaties er zijn opgetreden en verholpen.