

MEMO	EV/M04.079
Datum	31 augustus 2004
Auteur(s)	Edwin Vollebregt
Onderwerp	Voortgangsverslag over fase 2 van het droogvalproject

## 1 Inleiding

In het droogvalproject 2004, contract RKZ-1407, realiseert VORtech Computing met assistentie van het WL|Delft Hydraulics voor Rijkswaterstaat/RIKZ een nieuwe versie van WAQUA/TRIWAQ waarin diverse verbeteringen worden gemaakt met betrekking tot droogvallen en onderlopen. Bovendien worden WAQUA en TRIWAQ in dit project sterk geuniformeerd en afgestemd op het OMS-project.

Het project is in drie fases verdeeld. In fase 1 is een detail ontwerp voor de beoogde wijzigingen geschreven. Dit is op 11 juni bij RIKZ besproken en na kleine aanpassingen goedgekeurd. In fase 2 worden de zogenaamde “informatica-technische” aanpassingen aan WAQUA/TRIWAQ geïmplementeerd. Deze aanpassingen hebben geen wezenlijke invloed op de simulatieresultaten van sommen met bestaande invoer. Hierbij wordt ook een beperkt stuk nieuwe functionaliteit geïmplementeerd. Deze fase wordt op 31 augustus afgesloten. Tenslotte worden in fase 3 (september t/m november 2004) de aanpassingen aan de numerieke algoritmen van WAQUA/TRIWAQ geïmplementeerd.

Dit memo betreft een verslag van de werkzaamheden die in fase 2 zijn uitgevoerd. De volgende paragraaf geeft een overzicht van hoe het werk is aangepakt. Daarna beschrijft paragraaf 3 de opvallende zaken bij de aanpassing van de preprocessor WAQPRE. Vervolgens doen we hetzelfde voor het verwijderen van lgrid (paragraaf 4) en voor het aanpassen van de kenmerkarrays (paragraaf 5). Tenslotte geven we een overzicht van de testen die zijn uitgevoerd en de documentatie die is aangepast.

## 2 Overzicht

In de tweede fase worden de activiteiten van Tabel 1 van het werkplan uitgevoerd, hier herhaald als Tabel 1.

Bij de uitvoering van deze werkzaamheden zijn activiteiten 2-1, 2-3 en 2-5 grotendeels samengevoegd. Namelijk voor zover deze activiteiten invloed hebben op de preprocessor WAQPRE. Verder zijn ze door de zogenaamd ideale structuur van de invoerfile met elkaar verbonden. De werkzaamheden aan WAQPRE zijn door Nils van Velzen uitgevoerd, getest door Jan van Kester en Nils, en begeleid door Edwin Vollebregt.

Gelijktijdig aan bovenstaande werkzaamheden met betrekking tot WAQPRE heeft Bas van 't Hof activiteit 2-4 opgestart. Ten tijde van de vakantie van Bas begin juli heeft Nils hieraan verder gewerkt, onder andere om de testen van de nieuwe methode voor opgave van

Tabel 1: *Overzicht van de verschillende activiteiten in Fase 2.*

Nr.	Wat?	Soort	Rapport
2-1	<i>Gebruik DUPWND</i>	<i>Herstructureren Code</i>	<i>Hfd 6 - wens 3</i>
2-2	<i>Tijdsniveau toevoegen aan kenmerkarrays</i>	<i>Herstructureren Code</i>	<i>Hfd 6 - wens 7</i>
2-3	<i>Arrays DPU, DPV, KCU, KCV</i>	<i>Herstructureren Code</i>	<i>Hfd 6 - wens 8</i>
2-4	<i>Verwijderen LGRID uit WAQUA</i>	<i>Herstructureren Code</i>	-
2-5	<i>Dieptecijfers opgeven waterstandspunten</i>	<i>Nieuwe functionaliteit</i>	<i>Hfd 6 - wens 13</i>

dieptecijfers mogelijk te maken. Dit is geen gelukkige zet geweest omdat het vermengen van verschillende activiteiten een aantal extra fouten heeft geïntroduceerd. Na terugkeer van Bas heeft die zijn werk weer opgepakt en een voor een de verschillende tussenstappen van het plan afgewerkt. Dit wordt verder toegelicht in paragraaf 4. Tenslotte zijn in de tweede helft van augustus het resterende deel van activiteit 2-3 (KCU/V) en activiteit 2-2 uitgevoerd door Bas van 't Hof en Edwin Vollebregt, is de documentatie aangepast door Erik de Goede en Jan van Kester, en zijn de definitieve testen uitgevoerd door Bas van 't Hof en Edwin Vollebregt

In totaal zijn er in deze fase vijf nieuwe subroutines gemaakt, zeven subroutines overbodig gemaakt, en 183 files gewijzigd. Het aantal gewijzigde code-regels is ongeveer 17.000. Het grootste deel hiervan (15.000) betreft het deelsysteem WAQPRO. Dit systeem is van 276 files en 124.000 regels naar 267 files en 119.000 regels gegaan, en is dus bijna 5% kleiner (onderhoudbaarder?) gemaakt.

### 3 Aanpassingen aan WAQPRE voor activiteiten 2-1, 2-5 en 2-3

Bij de implementatie van de nieuwe invoeropties bleek de XOR-constructie van de generieke preprocessor niet te kunnen worden gebruikt. Dat is jammer omdat de technieken voor het vergelijken van strings daarvan nu niet beschikbaar zijn (m.n. m.b.t. aantal significante karakters). In plaats daarvan worden nu vaste strings geëist. Bijvoorbeeld "Y", "YES", "N" en "NO" maar niet "YE". Wel zijn overal hoofd- en kleine letters toegestaan.

Een andere aanpassing die nodig was betreft de defaultwaardes van verschillende parameters. Deze werden in de referentietabel gespecificeerd via de DEF-constructie van de generieke preprocessor. Het probleem daarmee was dat we in WAQPRE niet meer kunnen zien of de gebruiker een keyword heeft opgegeven of niet. Dat is echter nodig om te herkennen dat de oude invoermechanismen worden gebruikt en om de daarbij passende waarschuwingmeldingen te kunnen geven. Waar dit van toepassing is worden de defaultwaardes nu in het programma WAQPRE ingesteld.

Met de nieuwe opties is er verbetering gebracht in de mogelijkheden en leesbaarheid van de invoerfile. De precieze interpretatie van de verschillende methodes blijft echter lastig. Een steeds terugkerend probleem is of de naam "MAX" nu gaat over de grootste diepte of de hoogste bodemligging. Het antwoord hierop is als volgt

- In de arrays DPS, DPU, DPV en DPD worden de dieptes ten opzichte van het referentieniveau opgeslagen, *positief naar beneden*.

- De nieuwe namen van invoeropties geven aan waarvan het maximum of minimum wordt genomen (MAX\_DPD, etc.). MAX betekent dus *grootste diepte*, MIN is *kleinste diepte*.

Deze keuzes zijn conform de oude input (IDRYFLAG) en arrays DPS en HDRY. In arrays ZKS, ZKU en ZKV worden echter de echte  $z$ -posities opgeslagen, die *positief naar boven* worden bepaald.

De nieuwe arrays DPS, DPU, DPV en DPD en de variabelen TRSHUV en TRSHWL zijn overal waar van toepassing in WAQPRE en WAQPRO ingevoerd. Daarbij moest een aantal keer worden gekozen welke variant er zou worden gebruikt, waar er vroeger geen keuze mogelijk was. In subroutines `wap0s1` en `wap0s3` wordt de initiële waterstand aangepast m.b.t. de bodemligging. Hierbij wordt nu `trshwl` gebruikt in plaats van `var (trshuv)`. In subroutine `wapitb` (vertikale interpolatie i.g.v. restarts) is het uiteindelijk gewenst dat array DPS wordt gebruikt (voorheen H). Vooralsnog wordt array H gebruikt omdat anders de restart van oude SDS-files in het gedrang komt.

Een open vraag is of de huidige behandeling van open randpunten de meest geschikte is. De gebruiker moet nu ook in deze punten de diepte opgeven. Dat kan lastig zijn bij gebruik van bijvoorbeeld QUICKIN, omdat de open randpunten buiten het rooster liggen dat daar wordt beschouwd. Anderzijds is het spiegelen van dieptes volgens ons ook niet gewenst. Dat maakt het moeilijk om testkanaaltjes te maken waarin een constante bodemhelling wordt gebruikt.

#### 4 Activiteit 2-4, verwijdering van `lgrid`

Het verwijderen van `lgrid` uit WAQPRO is in een groot aantal deelstappen gedaan. Steeds zijn er testen uitgevoerd met een groot aantal testen van de testbank. In eerste instantie alleen met sequentiële sommen, later ook met parallelle sommen en met domein decompositie.

Gedurende het hele proces zijn een aantal complicaties en problemen opgetreden:

- Het bleek niet goed mogelijk om in subroutine `wagkni` de arrays `xzeta` en `yzeta` te vervangen door `gvu` en `guv` (par. 2.2.3). Deze arrays worden in WAQPRO namelijk berekend uit `guu` en `gvv`, en zijn daardoor niet in alle roosterpunten gelijk aan de afstanden die nu in `wagkni` worden bepaald. De aanpassing zou daarom ongewenste effecten op de rekenresultaten hebben en is daarom niet uitgevoerd.
- De voorgestelde aanpak voor subroutine `wagadw` (`fullbox`- en `lgrid`-versies binnen een enkele routine) bleek minder geschikt omdat ze complexe parameterlijsten zou opleveren. In plaats daarvan is subroutine `wagadw` gekopieerd naar `wapadw` (`lgrid`-versie) voor WAQPRE. Het is hier niet bezwaarlijk om twee keer dezelfde code te hanteren omdat het om een eenvoudige bewerking gaat die bovendien in de afgelopen 9 jaar niet is aangepast.
- Bij het vervangen van `sep`, `sepold`, `up` en `vp` in WAQUA door `sep`, `seh`, `up`, `uh`, etc. (einde van par. 2.2.5) is een waarschijnlijke fout in TRIWAQ ontdekt. In subroutine `wasspu` wordt in geval van TRIWAQ array `sepold` gevuld door het kopiëren van array `seh`, voordat de halve tijdstap wordt uitgevoerd. Dat is onlogisch omdat op dat moment

in het algoritme `sep` de “oude” waardes bevat. Hierdoor worden in de berekening van ruwheden bij het onderscheiden van eb en vloed in TRIWAQ andere waterstanden dan in WAQUA gebruikt.

- In subroutines `waschf` en `wascht` (compute histories) en `wassff` (forcings open randen, barriesturing) worden in TRIWAQ twee keer de waterstanden en snelheden van hele tijdstippen gebruikt. Dit lijkt een fout te zijn, in WAQUA worden de waardes van hele en halve tijdstippen gebruikt.
- De arrays `qx` en `qy` (debiet gehele vertikaal) worden in TRIWAQ alleen gebruikt als `kmax=1`, namelijk in de berekeningen voor overlaten. Ze worden echter altijd aangemaakt en als `kmax>1` met onzin gevuld (in `wasfgd`). Verder worden ze nooit aangepast, ook niet wanneer `kmax=1`, terwijl dit voor de berekeningen van overlaten wel nodig is.
- Bij het samenvoegen van berekeningen voor WAQUA en TRIWAQ is gebleken dat er soms verschillende waardes voor het landpunt (`iadlnd`) worden ingevuld. Bijvoorbeeld in arrays `hu` en `hv`. Worden deze default-waardes vaak gebruikt? Volgens ons levert het landpunt relatief veel gedoe en weinig voordeel op.

Bij een paar stappen zijn er verschillen in de rekenresultaten geïntroduceerd:

- Het aanpassen van subroutines `wasuwl` en `washrh` van de harmonische analyse (par. 2.2.4) levert andere resultaten in randpunten op. Dat is niet bezwaarlijk omdat deze resultaten toch al niet betekenisvol waren.
- De waterstanden `sepol` die in de berekening van bodemwrijving in TRIWAQ worden gebruikt zijn nu van hetzelfde tijdstip (`sep` i.p.v. oude `seh`) als in WAQUA.
- Het verwijderen van `lgrid` uit de rekenroutines `wasuxc` en `wassuc` leidt tot verschillen op afrondfoutniveau. Deze blijken vooral te ontstaan in de berekening van de viscositeitstermen. In de testen waren deze verschillen te omzeilen door het toevoegen van print-statements en door het uitschakelen van compiler-optimalisaties.
- De arrays `qx` en `qy` van WAQUA zijn vervangen door de arrays `qxk` en `qyk` van TRIWAQ. Hiermee is ook de fout in de berekeningen voor overlaten in TRIWAQ gerepareerd. Dit levert verschillen op in TRIWAQ-modellen met overlaten.
- De routines `wasguv` en `trsguv` voor het berekenen van roosterafstanden in WAQUA en TRIWAQ zijn samengevoegd. Hierbij is gebleken dat in WAQUA soms enkele punten worden overgeslagen met `m=1` of `n=1`, terwijl die punten in TRIWAQ wel werden meegenomen. In de nieuwe versie worden ze net als in TRIWAQ meegenomen, en dit levert verschillen in WAQUA op.
- In geval van DDHOR+VERT berekeningen bleek de verticale viscositeit in subdomeinen met 1 laag abusievelijk slechts een keer per tijdstap te worden bepaald (`call trsviz` in subroutines `wasspu/v`). Dit is gerepareerd en levert verschillen op in berekeningen waarin zowel horizontale als verticale verfijning wordt gebruikt.

Nieuwe ideeën die hierbij zijn ontstaan zijn als volgt:

- De roosterafstanden `gvu` en `guv` zouden nauwkeuriger kunnen worden berekend uit coördinaten dan de nu gebruikte de-stagging van andere afstanden.
- De routines van WAQPRO voor de conversie tussen `mmaxk` en `fullbox` zijn verhuisd naar WAQGEN. In deze routines staat dat er kopiën van zijn gemaakt voor het programma WAQPAN. Die kopiën kunnen worden geëlimineerd door in WAQPAN de routines van WAQGEN te gaan gebruiken.

Er is een test uitgevoerd om te bepalen of het mogelijk is om de tijdsafhankelijke arrays van de SDS-file gedurende het rekenproces te verwijderen. Dit blijkt inderdaad mogelijk, maar is net te veel werk om te worden uitgevoerd binnen dit project. De aanpak die hierbij kan worden gevolgd is de volgende:

1. De `mmaxk`-arrays die van de SDS-file zijn gelezen kunnen in het initialisatiegedeelte van WAQPRO worden verwijderd met `simc03` zodra ze naar `fullbox` zijn geconverteerd.
2. De `infor`-entries van deze arrays hoeven niet te worden opgeslagen in `intgda`.
3. Voorafgaand aan het wegschrijven van maps (o.a. subroutine `wasmaf`) worden de `mmaxk` arrays opnieuw aangemaakt met `simc00`. Hierbij moet ook het zogenaamde “solution type” correct worden ingevuld (`infor(12,.)`).
4. De `mmaxk`-arrays worden gevuld (`wagf1r`) en weggeschreven naar de SDS-file (`sidswr`), en kunnen dan weer worden verwijderd met `simc03`.

Deze aanpassingen zijn gewenst omdat het geheugengebruik van WAQUA/TRIWAQ er enigszins mee wordt beperkt (10-30%), en omdat de interne data-structuur van `intgda` er overzichtelijker door wordt.

Met betrekking tot de naamgeving van arrays met roosterafstanden (oude namen `guu`, `guv`, `gvu`, `gvv`, nieuwe namen `geu`, `gev`, `gku`, `gkv`) is er uiteindelijk voor gekozen om de nieuwe namen te verwijderen uit de programmatuur. Dit komt de uniformiteit ten goede.

Een aandachtspunt voor programmeurs aan WAQUA is dat de arrays `SEP`, `UP` en `VP` in WAQUA een iets andere betekenis hebben gekregen. Voorheen waren dit de nieuwste waardes, op hele of halve tijdstappen. Nu zijn dit altijd de waardes op hele tijdstappen en worden `SEH`, `UH` en `VH` voor de halve tijdstappen gebruikt.

Als laatste onderdeel van activiteit 2-4 is het mogelijk gemaakt om QH- en QAD-randen te gebruiken in TRIWAQ en zijn de berekeningen van maximale waardes en van incrementele uitvoer ook voor TRIWAQ geschikt gemaakt. QH-randen en maximale waardes zijn in TRIWAQ alleen beschikbaar wanneer er slechts 1 laag wordt gebruikt.

Om deze nieuwe functionaliteit te testen is er een TRIWAQ-versie gemaakt van het WAQUA testmodel “Lek2”, waarin beide soorten randen worden gebruikt. Zoals verwacht werden QAD-randen in de initiële versie niet verboden maar ook niet goed afgehandeld. Op

het gebruik van QH-randen in TRIWAQ werd wel gecontroleerd. Deze controle is aangepast zodat QH-randen in TRIWAQ mogen worden gebruikt wanneer `kmax=1`.

Het probleem met QH- en QAD-randen in TRIWAQ was dat het array `hu` wel al bestond, maar niet consequent berekend werd. Alleen wanneer `hu` naar de SDS-file moest worden geschreven werden de waardes bijgewerkt. De waardes die in bodemwrijvingsroutine `trschz` werden bepaald werden na gebruik weer weggegooid. In het Lek2-model leidde dit tot een veel te lage waterstand ( $-45\text{ cm}$  na 2 uur) omdat het debiet op de uitstroomrand (QH) werd onderschat door met een te lage doorstroomhoogte `hu` te werken.

We hebben ervoor gekozen om `hu` te laten berekenen aan het einde van subroutine `trssuw`. Mogelijk kan deze variabele later ook in het algoritme van TRIWAQ worden gebruikt, bijvoorbeeld in droogvalchecks. De berekende waardes worden ook in de bodemwrijvings- en overlaatroutines gebruikt. Overigens komt daarin ook een droogvalcontrole voor die overbodig lijkt.

In het verlengde van wat we nu met `hu` hebben gedaan lijkt het handig om nog enkele variabelen in TRIWAQ meer status te geven: `umean` en `qx`. Ook deze variabelen gaan over de totale diepte in plaats van over een enkele laag. In WAQUA en in TRIWAQ met 1 laag zouden deze arrays moeten samenvallen met de bestaande arrays zoals `up`, `hku` en `qxx`. Verder redenerend zouden de arrays `sep` en `dps` in TRIWAQ moeten kunnen samenvallen met de eerste en laatste “slice” van array `zks` (behoudens het teken van `dps`). Wanneer deze definities nu ook in WAQUA worden geïntroduceerd dan kunnen de rekenroutines veel verder op elkaar worden afgestemd. Het wordt daarmee ook mogelijk om QH-randen toe te staan in TRIWAQ met `kmax>1`.

## 5 Activiteiten 2-2 en 2-3, kenmerkarrays in WAQPRO

Het implementeren van de aanpassingen aan de kenmerkarrays in WAQPRO is vrij soepel gegaan. Zoals in het detailontwerp is beschreven zijn eerst KHU en KHV vervangen door KCU, KCV, KFU en KFV (activiteit 2-3), en zijn daarna verschillende arrays KFUP/H en KFVP/H voor hele en halve tijdstappen geïntroduceerd (activiteit 2-2).

Activiteit 2-3 bleek onverwacht lastiger te zijn dan activiteit 2-2. Bij 2-3 moesten namelijk in een groot aantal rekenroutines logische expressies worden omgezet. Alhoewel precies beschreven was hoe dit moest gebeuren zijn daarbij toch een paar vergissingen gemaakt. Bij activiteit 2-2 zijn uiteindelijk slechts drie rekenroutines aangepast. Binnen de overige routines worden de oude namen KFU en KFV gehandhaafd, en is het onderscheid van de tijdsniveaus van ondergeschikt belang.

Verder traden er bij activiteit 2-3 twee onverwachte moeilijkheden op:

- Het initialiseren van de nieuwe arrays KCU, KCV, KFU, KFV uit de arrays KHU, KHV bleek lastig te zijn doordat de kenmerkarrays enerzijds al nodig zijn bij de initialisaties van parallel rekenen en domein decompositie, terwijl er anderzijds in de initialisaties van DDHOR-berekeningen (“matchen van roosters”) een paar permanente schotjes kunnen worden bijgeplaatst (i.g.v. “gedeeltelijk gekoppelde cellfaces”). Het was daardoor moeilijk een goede volgorde van operaties te construeren, maar dit is uiteindelijk toch goed gelukt.

- Array KHU bleek in TRIWAQ een subtiele onvermoede functie te hebben. Wanneer er droogvallen van  $v$ -punten plaatsvond, dan werd KHU gebruikt om de oorspronkelijke schotjes aan het begin van de tijdstap terug te zetten, maar dat was niet goed aan de code te zien. Dit zelfde gedrag wordt nu met de arrays KFUH en KFUP bereikt.

Een aandachtspunt voor gebruikers van de user transportroutine is dat ook hierin KHU en KHV (samengevoegd tot KH) zijn vervangen door KFU en KFV (KF).

## 6 Testen

Voor het testen van de nieuwe invoeropties zijn twee testmodellen gebruikt: de “2D testbak WL” met put, en een klein model met een bult in het midden waarmee de verschillende droogvalthresholds goed kunnen worden gevisualiseerd.

Voor het testen van de informatica-technische aanpassingen is een testbank van 102 modellen gebruikt. De meesten hiervan zijn afkomstig van de testbank van *MX.Systems*. Verder bevat onze test-set de DDHOR-testbank en een aantal kleinere schematisaties waarmee numerieke fouten kunnen worden getraceerd (bijv. MOHA).

Met behulp van deze testbank is de nieuwe versie van de programmatuur grondig getest. In ongeveer de helft van de testen zijn de verschillen ten opzichte van de uitgangsversie exact 0. In 16 gevallen verschillen de waterstanden meer dan 1 cm (`ddh_test_10b`, `ddh_test_3a`, `grev`, `ijsm_parallel`, `ijssel`, `maas`, `maas1`, `maasdemo`, `moha_viscrefterms_off`, `read_from`, `rymamo`, `scaldis`, `t15`, `tmovnik`, `waal_viscrefterms_on`). In vier van deze gevallen (`scaldis`, `read_from`, `tmovnik`, `ddh_test_10b`) verdwijnen de verschillen wanneer bekende fouten in de uitgangsversie worden gerepareerd. In de overige twaalf gevallen verdwijnen de verschillen wanneer compiler-optimalisaties worden uitgezet.

De performance is alleen nog slechts globaal onderzocht. Er zijn sommen gedraaid op het Linux platform (GNU compiler) met de uitgangsversie en opgeleverde versie van de programmatuur voor de modellen CSM8 en Maasdemo. In het eerste geval is de totale doorlooptijd toegenomen van 64 naar 67 sec (+4, 7%), in het tweede geval van 381 naar 408 sec (+7, 1%). In fase 3 van dit project wordt de performance weer verbeterd. Zodra de programmawijzigingen van die fase zijn geïmplementeerd zullen de echte performancetesten worden gedaan.

## 7 Documentatie

De documentatie die is aangepast in deze fase is als volgt:

- de Users guide WAQUA, general gedeelte, Nederlandse versie,
- de Users guide WAQPRE, invoerbeschrijving, Engelse versie,
- de LDS-beschrijving voor het FLOW-gedeelte,
- het detail-ontwerp voor dit droogvalproject (TR04-02).

De Engelse/Nederlandse versies van de eerste twee documenten zullen worden aangepast nadat het commentaar op de huidige versies is verwerkt. De data-analyse van WAQUA/TRIWAQ uit rapport TR01-06 zal in fase 3 worden aangepast.