

MEMO EV/M07.040
Datum 25 juni 2007
Auteur(s) dr.ir. E.A.H. Vollebregt
Onderwerp Behandeling van specials in SIMONA

Documentinformatie

Versie	Auteur	Datum	Opmerkingen	Review
0.1	EV	18-06-2007	Eerste opzet van memo	CvV
0.8	EV	25-06-2007	Voorstellen voor keuzes toegevoegd	
Bestandslocatie: /v3/E05q_bo_simona/c73540-special-versies				

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
2	Doel van het huidige memo	2
3	Inventarisatie van bestaande specials	3
4	Discussie omtrent verdere ontwikkelingen	6
5	Voorstellen omtrent uitlevering aan gebruikers	7
6	Voorstellen m.b.t. integratieslagen	7
7	Organisatorische en financiële aspecten	8

1 Inleiding

In het verleden zijn er speciale versies van SIMONA cq. het rekenhart van Waqpro ontwikkeld voor specifieke doeleinden:

- Een versie met het programma “Lagint”, voor parallelle berekening in combinatie met Lagrangiaanse tijdsintegratie t.b.v. Slib3d;
- Een versie die de OMS Backbone gebruikt en kan samenwerken met de morfologie-module Delft3D-MOR;

- Een versie van WAQUA/TRIWAQ waarin de data-assimilatie via COSTA is gerealiseerd.

Op dit moment wordt er aan een vierde special gewerkt, te weten

- Een versie van WAQUA/TRIWAQ die op basis van OpenMI met Mike11 communiceert.

Deze specials kunnen niet eenvoudig of niet zonder ongewenste consequenties voor gebruikers in de moederversie van SIMONA worden geïntegreerd. Met name komt dit doordat de ontwikkelingen nog niet zijn uitgekristalliseerd. De versies zijn echter wel van belang voor gebruikers of voor toekomstige ontwikkelingen aan de programmatuur.

De specials worden momenteel niet systematisch beheerd. Ze lopen achter bij de moederversie van de programmatuur. Daardoor kunnen ze momenteel niet goed in projecten worden ingezet: de specials bevatten niet alle features die in nieuwere modellen worden gebruikt, de invoerfiles zijn niet volledig compatibel, en de specials geven mogelijk wat andere rekenresultaten dan waar de gebruiker op basis van andere versies van de programmatuur op vertrouwt.

Het bijwerken en gaan onderhouden van de specials kost echter wel een (mogelijk forse) inspanning. Daarom moet het aantal specials beperkt worden gehouden, en moet er worden gekozen welke specials op welke manier worden beheerd.

Gevraagd wordt om te komen tot een lijst afspraken rond verschillende edities van het rekenhart Waqpro.

2 Doel van het huidige memo

Het doel van de huidige change is om een plan van aanpak te maken voor het opnemen, bijwerken en ondersteunen van de specials. Belangrijk hierbij is dat er weloverwogen keuzes worden gemaakt voor:

- welke specials zouden moeten worden ondersteund;
- tot op welk niveau en in welk tempo worden de specials ge-updated met betrekking tot ontwikkelingen in de moederversie;
- hoe worden de specials vervolgens beheerd (up-to-date gehouden ten opzichte van de moederversie);
- onder welke voorwaarden worden de specials bekend gemaakt en uitgeleverd aan gebruikers.

Hiervoor moet een bespreking plaatsvinden met betrokkenen van RIKZ en van de dienstverleners. Tenslotte moet er een kostenschatting voor het vervolgwerk worden gemaakt.

3 Inventarisatie van bestaande specials

3.1 De special “Lagint”

De special Lagint is eind 2004 gerealiseerd. Deze special maakt het mogelijk om Lagrangiaanse tijdsintegratie te combineren met parallel rekenen. De uitvoer van de tijdsintegratie is essentiële invoer voor slibberekeningen. Voor gedetailleerde slibberekeningen is het gewenst dat de waterbeweging parallel berekend kan worden.

De gevraagde combinatie is bereikt via *proces-koppeling*: het gedeelte van TRIWAQ dat de tijdsintegratie verzorgt is in een apart programma Lagint gezet dat on-line gekoppeld kan worden met parallel TRIWAQ. Hiervoor is de communicatiebibliotheek **CouPLib** gebruikt, welke in eerste instantie voor parallellisatie van het RRSQRT Kalman filter ontwikkeld is. Deze bibliotheek wijkt af van de communicatiebibliotheek COCLIB die in de moederversie van SIMONA wordt gebruikt. Waar COCLIB geavanceerde functies voor domein decompositie bevat, is **CouPLib** juist sterk in de richting van proces-koppeling uitgebreid.

Numeriek gezien zijn er nauwelijks aanpassingen aan Waqpro gemaakt voor het realiseren van de special Lagint. Het enige wat is gedaan is het in een aparte bibliotheek zetten van de rekenroutines voor Lagrangiaanse tijdsintegratie, het niet meer aanroepen hiervan in Waqpro, en het toevoegen van communicaties op de goede momenten in de simulatie-loop. Daarnaast is het programma Lagint gedefinieerd. Dit bestaat uit een initialisatie-routine die van Waqpro is gekopieerd, en een tijdstap-loop die met Waqpro communiceert en vervolgens de tijdsintegratie aanstuurt.

De verschillende strategieën voor omgaan met deze special zijn als volgt, in volgorde van minder naar meer benodigde inspanning:

1. De bron-code van de huidige versie van de special, op basis van de oude rekenroutines van Waqpro en oude **CouPLib** op basis van PVM, kan in Subversion worden gezet;
2. De special kan opnieuw worden gerealiseerd voor wat betreft het numerieke deel, waarbij wordt uitgegaan van de nieuwe Waqpro waarin WAQUA en TRIWAQ zijn geüniformeerd, en waarbij de oude versie van **CouPLib** op basis van PVM wordt gebruikt. Dit levert een special die de goede rekenresultaten geeft maar niet voor domein decompositie kan worden gebruikt of worden uitgebouwd;
3. De “avail/obtain communicatie” van **CouPLib** kan opnieuw worden ontwikkeld uitgaande van de huidige versie van COCLIB, en daarmee kan Lagint opnieuw worden geprogrammeerd. In de avail/obtain communicatie wordt dan zo veel mogelijk aangesloten bij de huidige ideeën achter COCLIB, en worden geen koppelingsalgoritmes gebruikt;
4. Bovenop het vorige punt wordt de implementatie van COCLIB verbeterd via het gebruik van Fortran90 structs en dynamisch geheugenbeheer.

Het is ook mogelijk om in plaats van stap 3 (opnieuw programmeren van de speciale CouPLib-functionaliteit) uit te gaan van de bestaande implementaties van COCLIB en CouPLib, en deze met elkaar te integreren. Hiervoor is in rapport TR04-08 een plan gepresenteerd. Dat plan is nog redelijk up-to-date omdat er sinds 2005 geen grote wijzigingen aan COCLIB zijn gemaakt (overstap van PVM naar MPI en mogelijkheid van domein decompositie met procesvariëaties). De integratie is echter wel complex. Het lastigste stuk om te integreren betreft het parsen van de koppelingsalgoritmes van CouPEX. Het werk is waarschijnlijk gemakkelijker wanneer je niet aan de data-structuren van de oude implementatie gebonden bent.

Het is in stap 4 mogelijk om OMS Collections te gaan gebruiken in plaats van Fortran90 structs. Dit levert wat extra flexibiliteit op, bijvoorbeeld ten aanzien van de array-dimensies die nu hard zijn gecodeerd. Het betekent echter wel dat de OMS backbone moet worden beheerd.

3.2 De special “Waqua-MOR”

In het najaar van 2005 heeft WL|Delft Hydraulics met assistentie van VORtech een prototype-koppeling van WAQUA met de online sedimenttransport- en morfologiemodule van Delft3D-FLOW gerealiseerd. Dit project is uitgevoerd in opdracht van Rijkswaterstaat/RIKZ. Het achterliggende doel van het project was een grondige test van de OMS Backbone voor wat betreft de openheid van het OMS systeem voor data-uitwisseling.

De special is gerealiseerd door enerzijds WAQUA en anderzijds Delft3D-FLOW beiden “onder de OMS backbone te brengen”. In beide programma’s is de backbone meegelinkt en deze wordt voor het opstarten van de executables in een gekoppelde run gebruikt. Het prototype is beperkt tot de situatie waarin zowel de waterbeweging in WAQUA als de morfologische berekeningen in Delft3D-FLOW sequentiëel berekend worden. Verder moeten de invoerfiles voor SIMONA en voor Delft3D apart worden aangeleverd, maar wel consistent zijn met elkaar. Deze worden beiden uit Baseline gegenereerd. De special is verder gerealiseerd door op de goede plekken in beide programma’s data-uitwisseling via de OMS backbone aan te roepen.

In de bespreking van de plannen van RIKZ voor 2007 is genoemd dat het prototype zou kunnen worden uitgebreid, met name met parallel rekenen en domein decompositie. Voor deze uitbreiding moet er samen met WL|Delft Hydraulics een strategie/visie voor parallel rekenen en domein decompositie in gekoppelde modellen worden bedacht.

Er zal in de loop van 2007 een workshop worden georganiseerd voor het in kaart brengen en bespreken van de verschillende belangen bij en ideeën over de Waqua-MOR koppeling. Tot die tijd hoeft de special niet te worden ondersteund.

Strategieën voor het omgaan met de Waqua-MOR special zijn:

1. Opnemen van de oude bron-code van het SIMONA-gedeelte van het prototype in de Subversion repository, zonder aandacht voor de OMS backbone;

2. In beheer nemen van de OMS backbone: versiebeheer, uitlevering, support, bug-fixen, verbetering;
3. Overzetten van de uitbreidingen aan het programma Waqpro van het prototype naar de nieuwste versie van de SIMONA programmatuur;
4. In beheer nemen van het hele product, inclusief test-invoer, test-scripts, documentatie en inclusief de aanpassingen aan de Delft3D-programmatuur.

3.3 De special “Waqua-Costa”

Data-assimilatie wordt in allerlei vakgebieden gebruikt om modellen in de juiste richting te sturen met behulp van metingen. Enkele decennia terug is men hiermee in de meteorologie gestart omdat de modellen daar extreem gevoelig zijn voor beperkte fouten in de begincondities. Gaandeweg is er een aantal technieken ontwikkeld die robuust kunnen worden ingezet voor allerlei toepassingen, waaronder twee Kalman filter methodes die in WAQUA/TRIWAQ zijn geïmplementeerd. Alleen is er steeds meer inspanning nodig om zulke technieken toe te voegen aan bestaande modelprogrammatuur. Bovendien is de code voor data-assimilatie in WAQUA/TRIWAQ enigszins verweven geraakt met het waterbewegingsmodel zelf, waardoor het kostbaar is geworden om nieuwe technieken te ontwikkelen.

Om de beheersbaarheid en flexibiliteit te verhogen is in 2004 besloten om de data-assimilatie te reorganiseren. Omdat deze problematiek bij meer instituten in Nederland speelt is er onder de naam COSTA met een aantal partners een samenwerking gestart. In COSTA worden een generieke omgeving en bibliotheek voor data-assimilatie gerealiseerd. Het is de bedoeling dat deze vervolgens wordt gebruikt als vervanging voor de data-assimilatie die in SIMONA zelf is gecodeerd.

In 2005 is de eerste versie van de COSTA omgeving opgezet. Vanaf maart 2006 is hiermee een pilot met WAQUA/TRIWAQ uitgevoerd. Daarbij is het gedeelte van WAQUA/TRIWAQ met betrekking tot Kalman filtering verwijderd uit Waqpro, en vervangen door de implementatie van Kalman filtering in de COSTA bibliotheek. Dit heeft in de zogenaamde Waqua-Costa special geresulteerd.

De special kan worden gebruikt om nieuwe versies van COSTA te evalueren en met nieuwe Kalman-filters te experimenteren. De gedachte van Martin Verlaan en Nils van Velzen is echter om dit op een andere manier te organiseren. Volgens hun kan de moederversie van WAQUA/TRIWAQ gemakkelijk worden aangepast zodanig dat de gebruiker er niets van merkt, terwijl zij met COSTA kunnen oefenen. De huidige special hoeft dan niet te worden ondersteund.

3.4 De special “Waqua-OpenMI”

Vanaf 2001 is er binnen het Europese project HarmonIT gewerkt aan OpenMI: “Open Modelling Interface and Environment”. Dit systeem was bedoeld om hydraulische en hydrologische

modellen van verschillende partners (m.n. WL|Delft Hydraulics, HR Wallingford en DHI) aan elkaar te kunnen koppelen, en zo te komen tot substantiële verbeteringen in integraal waterbeheer.

RIKZ doet mee aan het 3-jarige Europese vervolgproject OpenMI-Life. Dit project heeft als lange-termijn doel om OpenMI te promoten als standaard voor het koppelen van modellen uit de omgevingswetenschappen. RIKZ doet concreet mee aan het onderdeel waarin een MIKE 11-model van het Vlaamse deel van de Schelde wordt gekoppeld aan het WAQUA-model KustZuid. Hierbij zal een special van WAQUA worden gerealiseerd.

Voor deze special geldt min of meer hetzelfde als voor de special Waqua-MOR: er zijn beperkte aanpassingen aan het rekenhart nodig, met name voor het verzorgen van data-uitwisseling, en voor de data-uitwisseling wordt een extern mechanisme gebruikt.

Met betrekking tot deze special lijken de volgende stappen gewenst:

1. De bron-code van het WAQUA-gedeelte van het gekoppelde systeem zou beheerd moeten worden via een branch in de SIMONA Subversion repository;
2. Het WAQUA-gedeelte kan regelmatig up-to-date worden gebracht ten aanzien van ontwikkelingen in de moederversie van SIMONA;
3. Het kan gewenst zijn om de versie van OpenMI waarop de special is gebaseerd te beheren bij de branch van de SIMONA programmatuur.

4 Discussie omtrent verdere ontwikkelingen

Een moeilijkheid bij de verdere ontwikkeling van de beschreven specials is dat ze op verschillende meningen over de samenwerking van rekenmodellen zijn gebaseerd. In de huidige moederversie, CouPLib en OMS worden modellen en subdomeinen als aparte entiteiten beschouwd die met elkaar samenwerken. In OpenMI worden modellen als objecten gezien die elkaar vragen stellen. En in COSTA wordt een tussenvorm gehanteerd, waarbij het model een aantal functies moet invullen die door het COSTA hoofdprogramma kunnen worden aangeroepen.

Deze verschillen maken het moeilijk om te komen tot een eenduidige ontwikkellijn voor de modelprogrammatuur.

Verder spelen er wat politieke belangen mee. CouPLib en COSTA worden sterk met VORtech geassocieerd, OMS is van Rijkswaterstaat en WL|Delft Hydraulics samen maar is ook nadrukkelijk op de ervaringen met CouPLib gebaseerd, en OpenMI is door WL|Delft Hydraulics met Europese partners opgesteld.

Een mogelijke lijn die kan worden ingezet is om ons te richten op een “service oriented architecture”, waarbij modellen *à la* OpenMI en COSTA in dll's worden georganiseerd en op verschillende manieren met elkaar kunnen worden gecombineerd. De parallelisatie van modellen wordt zo veel mogelijk verborgen gehouden en is voor WAQUA/TRIWAQ op COCLIB

gebaseerd. Voor communicatie tussen verschillende parallelle modellen moet nog een geschikte richting worden bepaald. Enerzijds kan dit door uitbreiding van OpenMI richting data-intensieve koppelingen worden ingevuld, anderzijds kunnen hierbij de ervaringen met de avail/obtain-communicatie van CouPLib nuttig zijn.

Hierover zou een discussie moeten worden gevoerd met de diverse betrokkenen. Dit zou moeten leiden tot een visie voor de langere termijn, die algemeen gedragen wordt.

5 Voorstellen omtrent uitlevering aan gebruikers

Ons voorstel is om alle vier de specials in principe beschikbaar te stellen aan gebruikers. Voor de Lagint-special is dit met name Johan de Kok, voor de Waqua-MOR special zou er interesse bij RIZA of DON kunnen bestaan, de Waqua-Costa special is vooral voor Martin Verlaan interessant, en de Waqua-OpenMI special zou door DZL of WLH Borgerhout kunnen worden gebruikt.

Wat er daadwerkelijk met de specials wordt gedaan (niveau en tempo van updaten ten opzichte van de moederversie van de programmatuur) zou wat ons betreft moeten worden bepaald door de plannen van gebruikers met de verschillende specials.

Een idee is om in de release-notes van komende releases te vermelden welke speciale versies opgevraagd kunnen worden, en daarmee te vragen om interesse in de specials kenbaar te maken. De interesse in de specials kan ook via de begeleidingsgroep van SIMONA of op een andere manier onder gebruikers worden geïnventariseerd.

Voor het uitleveren van de Waqua-MOR special is de programmatuur van het WL vereist, voor het uitleveren van de Waqua-OpenMI special de programmatuur van DHI. Hiervoor is extra afstemming vereist, alsmede ook mogelijk assistentie bij installatie van de programmatuur.

6 Voorstellen m.b.t. integratieslagen

De specials die van belang worden geacht zouden in versiebeheer moeten worden opgenomen. Dit kan niet worden gedaan voor de onderdelen van programmatuur van derden die wordt gebruikt (Mike 11, Delft3D-FLOW). Het lijkt wel nuttig om de gebruikte versie van externe programmatuur (COSTA, OpenMI) op te nemen in de SIMONA repository. Het Subversion boek biedt geschikte werkwijzen voor het van tijd tot tijd importeren van nieuwe versies van externe programmatuur.

De mate van modernisering van de specials hangt enerzijds af van de behoeftes en plannen van gebruikers. Anderzijds speelt de visie die men heeft op de lange termijn v.w.b. OMS, OpenMI, COSTA e.d. een rol.

- Bij de special Lagint bevelen we aan dat ook stappen 3 en 4 worden uitgevoerd. Stap 3 is voor COSTA van belang (Kalman filtering voor DDHOR-modellen), stap 4 voor uitbreiding van COCLIB, bijvoorbeeld voor prototyping met tijdstapkoppeling.

- Voor Waqua-MOR kunnen stappen 2 en 3 met weinig werk worden uitgevoerd. Hiermee kan worden gewacht totdat er meer duidelijkheid is over de toekomst van deze special.
- De Waqua-Costa special lijkt te kunnen vervallen wanneer er wat “hooks” ten behoeve van COSTA in de moederversie worden aangebracht.
- Voor Waqua-OpenMI kunnen zonder al te veel kosten alle drie de stappen worden uitgevoerd.

7 Organisatorische en financiële aspecten

Er moet worden afgesproken wie welke verantwoordelijkheden omtrent de specials heeft, en wie voor welke kosten verantwoordelijk is.

- De toevoeging van de specials, en van de gebruikte systemen CouPLib, OMS en OpenMI betekent een verzwaaring van het beheer en onderhoud.
- De extra kosten kunnen worden verrekend via het variabele onderhoud (changes), of door uitbreiding van het vaste contract. Uitbreiding van het vaste contract is met name nodig wanneer er een significant aantal service-calls met de nieuwe systemen is gemoeid. Het beheer en het maken van releases kan ook goed via changes worden betaald.
- We stellen voor dat verzoeken van gebruikers voor uitlevering van de specials steeds aan RIKZ worden voorgelegd voordat tot uitlevering wordt overgegaan.
- We stellen voor dat het upgraden van specials ten aanzien van ontwikkelingen in de moederversie op een ad-hoc manier wordt gedaan. Als een release van de moederversie significante wijzigingen bevat ten opzichte van de special dan kan de special tot op het niveau van de release worden bijgewerkt. Dit zal in veel gevallen snel gaan met het Subversion merge-commando, al kan er ook een integratieslag zijn vereist. Er zal per geval een plan en tijdschatting ter goedkeuring worden voorgelegd aan RIKZ.
- Verdere ontwikkeling en uitbouw van de specials wordt door RIKZ gecoördineerd en via changes of opdrachten aan derden uitgevoerd.