

AFGEHANDELD

Opdrachtgever:

Rijkswaterstaat, Dienst Getijdewateren

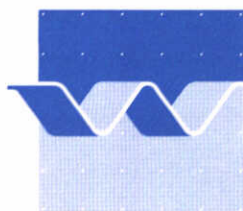
Een vereenvoudigde numerieke methode in TRISULA

November 1993

	bibliotheek postbus 177 - 2600 MH Delft waterloopkundig laboratorium/WL
BB	8505
WL	
EXPL	 R0001462

Een vereenvoudigde numerieke methode in TRISULA

E.D. de Goede en G.S. Stelling



Inhoud

1	Inleiding	1 — 1
2	Een vereenvoudigde methode voor TRISULA	2 — 1
3	Resultaten voor 2D testproblemen	3 — 1
3.1	Het Manukau haven testprobleem	3 — 1
3.2	Het Segara Anakan testprobleem	3 — 1
3.3	Het RIJMAMO model	3 — 2
4	Resultaten voor ADI methode bij 3D testproblemen	4 — 1
4.1	Het Manukau haven testprobleem	3 — 1
4.2	Het Maracaibo testprobleem	3 — 1
5	Vereenvoudigingen voor de AOI methode	5 — 1
6	Overzicht rekentijden	6 — 1
7	Rekentijden en geheugengebruik voor een 3D RIJMAMO model	7 — 1
8	Conclusies	8 — 1
9	Referenties	9 — 1
	Appendix A: Beschrijving van TRISULA routines	r — 1

Lijst van tabellen

- 1 Rekentijden voor 2D Manukau haven model
- 2 Rekentijden voor 2D Segara Anakan model
- 3 Rekentijden voor 2D RIJMAMO model
- 4 Rekentijden voor 3D Segara Anakan model
- 5 Rekentijden voor 3D Manukau haven model
- 6 Rekentijden voor 3D Keeten Volkerak model
- 7 Rekentijden voor computers
- 8 Rekentijden voor numerieke methoden
- 9 Rekentijden voor datastructuren
- 10 Rekentijden en geheugengebruik voor een 2D RIJMAMO model
- 11 Rekentijden en geheugengebruik voor een 3D RIJMAMO model

Lijst van figuren

- 1 Geometrie van Manukau haven
- 2 Vectorplots voor Manukau haven op $t=1500$ min.
- 3 Vectorplots voor Manukau haven op $t=2220$ min.
- 4 Tijdreeksen voor Manukau haven
- 5 Geometrie van Segara Anakan lagune
- 6 Vectorplots voor Segara Anakan op $t=1440$ min.
- 7 Vectorplots voor Segara Anakan op $t=2880$ min.
- 8 Tijdreeksen voor Segara Anakan in station Western Outlet
- 9 Tijdreeksen voor Segara Anakan in station Tanjung
- 10 Geometrie van RIJMAMO model
- 11 Waterstanden voor RIJMAMO model in drie stations
- 12 Snelheden voor RIJMAMO model in drie stations
- 13 Vectorplots voor Meer van Maracaibo met ADI methode op $t=720$ min.
- 14 Vectorplots voor Meer van Maracaibo met vereenvoudigde methode op $t=720$ min.
- 15 Vectorplots voor Meer van Maracaibo met ADI methode op $t=1440$ min.
- 16 Vectorplots voor Meer van Maracaibo met vereenvoudigde methode op $t=1440$ min.
- 17 Waterstanden voor Meer van Maracaibo
- 18 Geometrie van Keeten Volkerak
- 19 Waterstanden voor 3D Keeten Volkerak model
- 20 Snelheden voor 3D Keeten Volkerak model in Zijpe
- 21 Snelheden voor 3D Keeten Volkerak model in Oostkop
- 22 Vectorplots voor vereenvoudigde AOI methode bij 3D Keeten Volkerak model
- 23 Vectorplots voor AOI methode bij 3D Keeten Volkerak model

1 Inleiding

In dit rapport worden de ervaringen beschreven die zijn opgedaan met het vereenvoudigen van de numerieke methode die in TRISULA gebruikt wordt. Tevens zullen op diverse computersystemen de reketijden voor TRISULA onderzocht worden. TRISULA is een programma voor de simulatie van de waterbeweging en de waterkwaliteit in twee en drie dimensies (Waterloopkundig Laboratorium, 1993a). Het berekent stromingen die beschreven worden door de ondiep-watervergelijkingen. Dit stelsel van vergelijkingen bestaat uit bewegingsvergelijkingen, de continuïteitsvergelijking en de transportvergelijking.

Er is onderzoek gedaan naar de reductie in reketijd en naar het verlies in nauwkeurigheid die de vereenvoudigingen te weeg brengen. Dit onderzoek wordt ingegeven door het RIJMAMO (RIJN MAAS MONDING) model. Het RIJMAMO model omvat het kustgebied en het benedenrivierengebied rond de Nieuwe Waterweg en het Haringvliet (Waterloopkundig Laboratorium, 1993b). Dit model bevat dermate veel roosterpunten en er worden dermate veel tijdstappen uitgevoerd, dat nieuwe technieken, zoals bijvoorbeeld het vereenvoudigen van de numerieke methode, noodzakelijk zijn om zowel de reketijd als het geheugengebruik te verminderen. Dit geldt zelfs voor supercomputers. Één van de doelstellingen in dit onderzoek is het inzicht verkrijgen in de benodigde reketijd en geheugencapaciteit voor een 3D RIJMAMO model met tien lagen in de vertikaal. Dit zal in paragraaf 7 besproken worden.

De numerieke resultaten en reketijden van het vereenvoudigde schema worden vergeleken met de standaard TRISULA versie. We zullen zowel 2D als 3D testproblemen onderzoeken. De experimenten worden uitgevoerd op een HP 735 werkstation (WL) en op de CRAY Y-MP4 van SARA (Stichting Academisch Rekencentrum Amsterdam). Deze CRAY heeft vier processoren. Er is echter geen gebruik gemaakt van de parallelle faciliteiten.

2 Een vereenvoudigde methode voor TRISULA

In deze paragraaf worden de vereenvoudigingen beschreven die voor de numerieke methode in TRISULA worden toegepast. De huidige methode in TRISULA is een Alternating Direction Implicit (ADI) methode. Door de discretisatie van de vergelijkingen te vereenvoudigen, is getracht een grote winst in rekentijd te bewerkstelligen zonder dat dit al te zeer ten koste gaat van de nauwkeurigheid. De vereenvoudigingen zijn gebaseerd op het volgende:

- a) De numerieke discretisatie van de advection termen slechts eerste orde upwind in de plaats en expliciet in de tijd. Dit geldt zowel voor de waterbewegingsvergelijkingen als voor de transportvergelijking.
- b) Een gelineariseerde continuïteitsvergelijking (de totale diepte H wordt vervangen door de diepte h , zie (Waterloopkundig Laboratorium, 1993a)).

In dit rapport zullen namen van TRISULA-routines voorkomen. Appendix A bevat daarom een lijst van routines met daarbij een korte beschrijving. In TRISULA wordt voor de advection termen een combinatie van tweede orde centrale differenties en tweede orde upwind differenties toegepast. De centrale differenties worden expliciet en de upwind differenties worden impliciet geïntegreerd in de tijd (Waterloopkundig Laboratorium, 1993a). Vereenvoudiging a) betekent dat routine UZD niet meer aangeroepen wordt en dat de afhandeling van de advection termen in routine CUCNP vereenvoudigd is ten gevolge van de eerste orde differenties. Voor het stoftransport dient slechts een triagonaal stelsel opgelost te worden vanwege de impliciete tijdsintegratie in de vertikaal. Vanwege de gelineariseerde continuïteitsvergelijking verdwijnt het (niet-lineaire) iteratieproces in routine SUD. Er is geen iteratieproces meer aanwezig in het vereenvoudigde schema.

Tijdens de experimenten gaven de bovenstaande vereenvoudigingen aanleiding tot een vermindering van de rekentijd met ongeveer een factor twee. In veel gevallen vergden de overige routines, dus alle routines uitgezonderd DIFU, SUD en UZD, relatief veel rekentijd (zie ook (Van Kester, 1992)). Om tot een hogere reductie te komen, dient deze overhead verminderd te worden. De volgende extra vereenvoudigingen worden daarom toegepast:

- c) voor 2D experimenten wordt routine TAUBOT slechts één keer per tien tijdstappen aangeroepen.
- d) voor 3D experimenten wordt routine VICOM slechts één keer per tien tijdstappen aangeroepen.
- e) voor 3D experimenten wordt routine DIHTUR uitgeschakeld.
- f) voor 3D experimenten wordt routine VIHTUR uitgeschakeld.

Door de vereenvoudigde c.q. expliciete afhandeling van de advection termen bleek de stabiliteit aanzienlijk verminderd te zijn. Als extra optie hebben we daarom opgenomen dat de advection termen volledig uitgeschakeld kunnen worden.

3 Resultaten voor 2D testproblemen

Voor 2D testproblemen hebben we speciale routines ontwikkeld. Berekeningen die alleen voor 3D modellen van toepassing zijn, zoals voor de verticale advection en diffusie, zijn weggelaten. Dit levert in het algemeen een winst in rekentijd op van 10 à 20% in vergelijking met de 3D code voor één laag. Voor de 2D testproblemen worden de vereenvoudigingen a, b en c toegepast (zie paragraaf 2).

De vereenvoudigde numerieke methode is getest voor de volgende 2D testproblemen:

- 1) De Manukau haven
- 2) De Segara Anakan lagune
- 3) Het RIJMAMO model

3.1 Het Manukau haven testprobleem

De Manukau haven is een gebied bij Auckland in Nieuw Zeeland (Waterloopkundig Laboratorium, 1987). Dit estuarium heeft een grillige geometrie (zie Fig. 1) en is verbonden met de Straat van Tasmanië door middel van een kanaal. Dit testprobleem heeft het volgende aantal roosterpunten: $MMAX=77$, $NMAX=52$ en $KMAX=1$. Hierbij geven $MMAX$ en $NMAX$ het aantal roosterpunten in de horizontale richting aan, terwijl $KMAX$ het aantal lagen in de verticale richting representeert. De tijdstap is 30 sec en het aantal tijdstappen is 4500. Het courantgetal is vier. In Tabel 1 zijn rekentijden weergegeven.

Tabel 1	Standaard TRISULA	Vereenvoudigd schema
HP 735	912 sec	291 sec
CRAY Y-MP4	234 sec	85 sec

Het vereenvoudigde schema is op beide computers ongeveer een factor drie sneller. In Fig. 2 t/m 4 zijn numerieke resultaten voor dit testprobleem weergegeven. Globaal gezien komen de resultaten goed overeen. Zowel in de vectorplots als bij de tijdreeksen zijn nauwelijks verschillen waarneembaar. Lokaal treden er grotere verschillen op. Op $t=2880$ min is de maximale fout voor de waterstand 0.18 m, waarbij de gemiddelde waterstand 3 m is. Voor de snelheden, die maximaal 0.7 m/s zijn, is er een grootste afwijking van ongeveer 0.15 m/s.

3.2 Het Segara Anakan testprobleem

Segara Anakan is een lagune aan de zuidkust van Java. Deze lagune is op twee plaatsen verbonden met de Indische Oceaan en heeft een oppervlakte van ongeveer 50 km² (Waterloopkundig Laboratorium, 1993c). Bij dit testprobleem is $MMAX=101$, $NMAX=57$ en $KMAX=1$ (zie Fig. 5).

De tijdstap is 120 sec en de simulatieperiode is 48 uur. Het bijbehorende courantgetal is 60. Voor het vereenvoudigde schema bleek het vanwege stabiliteitsredenen noodzakelijk de advectionstermen volledig weg te laten. De versie met de eerste orde differenties voor de advectionstermen bleek pas stabiel als de tijdstap met een factor vier verkleind werd. Tabel 2 bevat rekentijden.

Tabel 2	Standaard TRISULA	Vereenvoudigd schema
HP 735	380 sec	125 sec
CRAY Y-MP4	98 sec	27 sec

De nauwkeurigheid van het vereenvoudigde schema is wederom vergelijkbaar met die van TRISULA. Op het eindtijdstip zijn de maximale snelheden groter dan 1 m/s. Alleen lokaal treden er grotere verschillen op. De grootste afwijking is in de orde van 20 cm/s.

In Fig. 6 t/m 9 zijn numerieke resultaten weergegeven. Uit Tabel 2 en uit de figuren blijkt dat de resultaten voor het Segara Anakan testprobleem ongeveer overeenkomen met de resultaten voor de Manukau haven. Het vereenvoudigde schema is ruwweg een factor vier sneller. De rekentijden voor de CRAY Y-MP zijn een factor vier lager dan voor de HP 735. Op de CRAY Y-MP4 blijkt de vectorversie een factor vijf sneller dan de scalaire versie.

3.3 Het RIJMAMO model

De hierboven beschreven experimenten zijn uitgevoerd om een indruk te krijgen van de afname van de rekentijd en de nauwkeurigheid wanneer de vereenvoudigingen toegepast worden. Het uitgangspunt van dit onderzoek is echter het RIJMAMO model. Dit model bevat zeer veel rekenpunten, te weten 236×446 in de horizontale richting. In dit experiment wordt een 2D (diepte-gemiddeld) RIJMAMO model zonder stoftransport gebruikt, zie (Waterloopkundig Laboratorium, 1993b). In paragraaf 4.3 zullen we een 3D RIJMAMO model beschouwen. De horizontale maaswijdte varieert van 50 m tot ongeveer 1.5 km. De dieptes liggen tussen 8 m en 26 m. In dit experiment bedraagt de simulatieperiode 24 uur en de tijdstap is 60 sec. Het rooster is kromlijng (zie Fig. 10). Op de zeerand van het model worden waterstanden voorgeschreven. Voor de ADI methode is op grond van nauwkeurigheidsredenen vastgesteld dat de maximale tijdstap 60 sec bedraagt. Het courantgetal is 25.

In Fig. 11 en 12 worden tijdreeksen voor waterstanden en snelheden weergegeven. Lokaal kunnen er grote verschillen optreden, bijvoorbeeld 10 cm voor de waterstanden. Globaal gezien komen de resultaten wel overeen. De grote verschillen zijn te wijten aan de invloed van de advectionstermen.

Experimenten op de HP 735 (WL) en op de CRAY Y-MP4 (SARA) hebben geleid tot reketijden die in Tabel 3 zijn weergegeven. De vereenvoudigingen leveren een reductiefactor van ongeveer 2.5. De reketijden op de HP 735 zijn wederom een faktor vier hoger dan op de CRAY Y-MP4.

Tabel 3	Standaard TRISULA	Vereenvoudigd schema
HP 735	6125 sec	2356 sec
CRAY Y-MP4	1586 sec	609 sec

De performance op de CRAY Y-MP van de volledige TRISULA code is ongeveer 40 Mflops (millions of floating-point operations per second). Het aantal Mflops geeft echter geen goede indicatie over de efficiëntie van de TRISULA code. Het aantal Mflops is laag, omdat er relatief zeer weinig actieve rekenpunten zijn. Voor de andere experimenten die in dit rapport beschreven zijn, is de performance hoger (60 Mflops). Ter illustratie bekijken we een DO-loop die kenmerkend is voor de TRISULA-code:

```

DO 100 NM=1,NMAX * MMAX
  IF (KFU(NM) .EQ. 1 ) THEN
    U(NM) = U(NM) + 2 * D(NM)
  ENDIF
100 CONTINUE

```

Deze loop leidt tot een performance van 40 Mflops. Wanneer we het IF-statement eruit halen, dan neemt de reketijd iets af (5 à 10%) en wordt de performance 190 Mflops! Dit doet vermoeden dat de CRAY performance monitor slechts bewerkingen telt die aan de if-conditie voldoen. De geringe afname in reketijd en de bijbehorende hoge performance geven aan dat de reketijden voor de huidige TRISULA versie bevredigend zijn.

Bij het RIJMAMO model is ongeveer 16% van de rekenpunten actief. Op de CRAY Y-MP hebben we daarom een aantal varianten onderzocht waarbij alleen in actieve punten gerekend wordt. Hiermee hopen we de reketijden te verminderen. Als eerste hebben we een versie ontwikkeld die berekeningen uitvoert via de IROCOL tabel (Stelling, 1991). De DO-loops hebben dan de volgende structuur:

```

DO 200 IC=1,NOROW
  N = IROCOL(1,IC)
  MF = IROCOL(2,IC)-1
  ML = IROCOL(3,IC)
  DO 200 M=MF,ML { rij voor rij rekenen }
    U(M,N) = U(M,N) + 2 * D(M,N)
200 CONTINUE

```

Deze aanpak leidt voor het RIJMAMO-model tot een toename van de rekentijd met 30%. Er worden weliswaar minder bewerkingen uitgevoerd, maar daar staat tegenover dat de performance aanzienlijk is afgenomen. De vectorlengte is immers zeer veel kleiner geworden.

Door middel van een LGRID-achtige techniek kunnen alle rijen of kolommen in één lange vector gezet worden. Dit leidt tot DO-loops van de volgende vorm:

```
DO 300 INM=1,NMMAXK      { NMMAXK= aantal actieve punten }
  NM    = INV_LGRID(INM)
  U(NM) = U(NM) + 2 * D(NM)
300 CONTINUE
```

Het INV_LGRID array bevat pointers naar de actieve punten. De INV_LGRID functie kan beschouwd worden als de inverse van de LGRID functie die in WAQUA gebruikt wordt. Met deze aanpak wordt geen geheugenruimte bespaard, in tegenstelling tot de LGRID aanpak. Er staat tegenover dat deze aanpak eenvoudig geprogrammeerd kan worden. Dit levert een halvering van de rekentijd (en 80 Mflops). Voor het RIJMAMO model neemt de vectorlengte en dus het aantal bewerkingen met een factor zes af. Er dient nu indirecte adressering (de zogeheten "gather" en "scatter" operaties) toegepast te worden (SARA, 1993). Deze variant is getest voor de belangrijkste rekenroutines. Voor het gehele programma lijkt een dergelijke reductie ook haalbaar.

Op de CRAY Y-MP wordt indirecte adressering met een relatief hoge performance uitgevoerd. Daarentegen is van de NEC SX bekend, dat dergelijke bewerkingen een zeer lage performance hebben. Op de NEC SX3 is deze aanpak dus af te raden. De reductiefactor die met de INV_LGRID techniek behaald wordt, is dus computerafhankelijk. Tevens dient opgemerkt te worden dat deze techniek alleen winst oplevert bij een zeer laag percentage van actieve punten. Bij het RIJMAMO model wordt winst behaald. In het algemeen zal dit niet het geval zijn.

Voor het RIJMAMO-model kan de inverse LGRID-techniek gecombineerd worden met de in dit rapport beschreven vereenvoudigingen. Aldus lijkt een reductie in rekentijd van een factor vijf haalbaar.

4 Resultaten voor ADI methode bij 3D testproblemen

Bij de 3D testproblemen is gebruik gemaakt van een algebraïsch turbulentiemodel (Waterloopkundig Laboratorium, 1993b). In deze experimenten zijn de vereenvoudigingen a, b, d, e en f (zie paragraaf 2) toegepast. Tevens is de advectionsterm volledig weggelaten. De vereenvoudigde ADI methode is getest voor de volgende 3D testproblemen:

- 1) Het Segara Anakan testprobleem
- 2) Het Maracaibo testprobleem

4.1 Het Segara Anakan testprobleem

Voor het 3D Segara Anakan testprobleem volstaan wij met een tabel van rekentijden (zie Tabel 4). Evenals bij het 2D experiment is de tijdstap 120 sec en is de simulatieperiode 48 uur. Er zijn vijf lagen in de verticale richting ($K_{MAX}=5$).

Tabel 4	Standaard TRISULA	Vereenvoudigd schema
HP 735	2290 sec	724 sec
CRAY Y-MP4	592 sec	193 sec

Door de extra vereenvoudigingen voor 3D modellen (zie vereenvoudiging d, e en f in paragraaf 2) is de reductie in rekentijd min of meer vergelijkbaar met die in 2D experimenten. Voor wat betreft het verlies van nauwkeurigheid zijn de resultaten ook overeenkomstig de 2D resultaten. De numerieke resultaten komen goed overeen.

4.2 Het Maracaibo testprobleem

Als tweede testprobleem hebben we het meer van Maracaibo beschouwd, dat ligt in het westen van Venezuela. Het meer van Maracaibo staat via de Straat van Maracaibo in open verbinding met de Golf van Venezuela (zie Fig. 13). De afmetingen zijn groot. De breedte van dit meer is 110 km en de lengte is 200 km. Bij dit testprobleem is $M_{MAX}=16$, $N_{MAX}=64$ en $K_{MAX}=13$. De tijdstap is 150 sec en het aantal tijdstappen is 576. Het courantgetal is 3.5. In dit experiment wordt ook transport van zoet en zout water gesimuleerd. De rekentijden in Tabel 5 geven aan dat de reductie in rekentijd bijna een factor drie is.

Fig. 13 t/m 17 bevatten de numerieke resultaten. Uit zowel de vectorplots als de tijdreeksen blijkt dat er lokaal aanzienlijke verschillen optreden. Er treden met name verschillen op bij de open rand. Dit betekent dat voor dit testprobleem het vereenvoudigde schema met de nodige voorzichtigheid toegepast dient te worden.

Tabel 5	Standaard TRISULA	Vereenvoudigd schema
HP 735	640 sec	214 sec
CRAY Y-MP4	175 sec	73 sec

5 Vereenvoudigingen voor de AOI methode

De huidige numerieke methode die in TRISULA gebruikt wordt, is gebaseerd op een ADI (Alternating Direction Implicit) factorisatie van de tijdstap. Bij de ADI methode wordt de grootte van de tijdstap bepaald door de geometrie van het gebied (het zogenaamde ADI-effect) en niet door tijdschalen van fysische processen. Dit kan leiden tot een beperking van de tijdstap. Deze beperking van de tijdstap kan vermeden worden door een zogeheten Alternating Operator Implicit (AOI) factorisatie van de tijdstap (Mooiman, 1993). Per tijdstap vereist de AOI methode meer bewerkingen dan de ADI methode. In het algemeen zal de AOI methode echter minder rekentijd vergen, omdat de tijdstap groter gekozen kan worden.

De vereenvoudigingen die in dit rapport besproken worden, kunnen ook toegepast worden voor de AOI methode. We merken op dat vereenvoudigingen c t/m f (zie paragraaf 2) niet toegepast zijn. Bij de AOI methode zullen alleen de routines VICOM en TAUBOT slechts één keer per tijdstap aangeroepen worden (i.p.v. één keer per tien tijdstappen).

Voor een 3D Keeten Volkerak model zullen we de vereenvoudigde AOI methode testen. Het Keeten Volkerak is een estuarium in Zeeland. In het verleden was dit estuarium verbonden met de Oosterschelde. Na de bouw van de Philipsdam is het Keeten Volkerak niet langer verbonden met open zee. In ons testprobleem zal de oude situatie beschouwd worden. In Fig. 18 wordt de geometrie van het Keeten Volkerak model weergegeven. Het rechthoekige rooster heeft maaswijdtes van $\Delta x = \Delta y = 200$ m. Het estuarium heeft een lengte van 35 km, een breedte van 10 km en een karakteristieke diepte van 10 m. Het aantal roosterpunten in de horizontale richting is 143×61 . Het aantal lagen in de vertikaal is 10. In dit experiment wordt geen stoftransport beschouwd. De simulatieperiode bedraagt 12 uur. De tijdstap voor de ADI methode is 1.25 min (courantgetal 10), terwijl de tijdstap voor de AOI methode 7.5 min bedraagt (courantgetal 60). Voor de initiële waterstand geldt $\zeta = 1.75$ m, wat overeenkomt met hoog water.

In Fig. 19 t/m 23 worden tijdreeksen en vectorplots weergegeven voor de ADI methode, de AOI methode en de vereenvoudigde AOI methode. Fig. 19 bevat waterstanden in vier stations. Fig. 20 t/m 22 bevatten tijdreeksen voor twee stations, te weten Oostkop en Zijpe. Uit de tijdreeksen blijkt dat de resultaten voor de vereenvoudigde methode afwijken van de ADI en de AOI methode. Dit wekt geen verbazing, omdat de advectieve termen een belangrijke rol spelen in dit estuarium.

Tabel 6	Rekentijden op HP 735
ADI methode	2073 sec
vereenvoudigde ADI methode	672 sec
AOI methode	549 sec
vereenvoudigde AOI methode	218 sec

De vereenvoudigde methode leidt tot een reductie in rekentijd van een factor 2.5 à 3 (zie Tabel 6). Aangezien de AOI methode een factor 3.8 efficiënter is dan de ADI methode, is de vereenvoudigde AOI methode bijna een factor 10 sneller dan de ADI methode. De vereenvoudigde AOI methode is aanzienlijk goedkoper dan de ADI methode die in TRISULA gebruikt wordt. Met name voor testproblemen waarin de advection termen een geringe rol spelen, vormt deze methode een aantrekkelijke alternatief.

In deze paragraaf is de vereenvoudigde AOI methode getest voor een 3D Keeten Volkerak model. Deze methode is niet getest voor het 2D RIJMAMO model, omdat hiervoor nauwelijks enige winst in rekentijd te behalen valt. Dit wordt verklaard door het feit dat voor een 2D RIJMAMO model de rekenkosten voor de advection termen gering zijn t.o.v. de rekenkosten voor de overige termen in de vergelijkingen. Bij een 3D RIJMAMO model zullen de vereenvoudigingen wel een behoorlijke reductie in rekentijd opleveren.

6 Overzicht rekentijden en geheugengebruik

In de afgelopen tijd is er de nodige inzicht verkregen in rekentijden en geheugengebruik voor numerieke technieken op verschillende computersystemen. In deze paragraaf zullen we een overzicht geven van reductiefactoren die naar onze inschatting te behalen zijn. Er wordt een onderverdeling gemaakt in drie categorieën, te weten computers, numerieke methoden en datastructuren.

Allereerst zullen we in Tabel 7 een overzicht geven rekentijden voor verschillende computers. Als referentie wordt de HP 735 genomen. Deze tabel geeft aan dat bijvoorbeeld de CRAY Y-MP een factor vier sneller is dan de HP 735. De volgende opmerkingen dienen geplaatst te worden:

- a) Onlangs heeft het WL de beschikking gekregen over een HP735. Omdat de HP735 en de HP755 een bijna identieke configuratie hebben, valt te verwachten dat de rekentijden voor beide computers vergelijkbaar zullen zijn.
- b) In het begin van '94 zal de CRAY Y-MP4/464 van SARA vervangen worden door een CRAY C98/4256. Om die reden is een schatting voor de CRAY C98 opgenomen. Deze schatting is gebaseerd op rekentijden voor een 3D ondiepwatermodel. Het typenummer C9-8/4-256 geeft aan dat het een supercomputer uit de C90 serie is, dat acht het maximale aantal processoren is, dat er vier processoren aanwezig zijn en dat het voorzien is van 256 miljoen woorden zeer snel toegankelijk geheugen. Ter vergelijking, de CRAY van Icim heeft een Y-MP2E/132 configuratie.
- c) Voor de NEC SX3 is een reductiefactor geschat op grond van de TRISULA resultaten in (Van Kester, 1992).
- d) Hoewel de bovengenoemde supercomputers over meerdere processoren beschikken, worden rekentijden voor één processor gegeven.

Tabel 7	Verhouding in rekentijden
HP 735	1
CRAY Y-MP4/464	4
CRAY C98/4256	10
NEC SX3	13

Tabel 8 bevat verhoudingen in rekentijden voor verschillende numerieke methoden. De huidige ADI methode in TRISULA wordt als referentie gebruikt. De rekentijden voor de AOI methode zijn gebaseerd op resultaten voor het Keeten Volkerak model met tien lagen in de vertikaal. Hierbij is verondersteld dat de AOI methode met een zes keer zo grote tijdstap rekent dan de ADI methode. Voor de ADI methode wordt in het algemeen een courantgetal van 5 à 10 gebruikt, terwijl voor de AOI methode een courantgetal van 50 een goede keuze is. In de volgende paragraaf zullen rekentijden beschouwd worden die specifiek voor het RIJMAMO model gelden.

Tabel 8	Verhouding in reketijden
ADI methode	1
ADI methode + vereenvoudigingen	3
AOI methode	3.5
AOI methode + vereenvoudigingen	10

Tenslotte zullen we de invloed beschouwen van technieken die betrekking hebben op de datastructuur (zie Tabel 9). De inverse LGRID-techniek is beschreven in paragraaf 5. Deze aanpak is alleen van toepassing op supercomputers. Bovendien dient er een zeer laag percentage van actieve punten te zijn (zie paragraaf 3.3).

De tweede techniek die we zullen beschouwen is de zogeheten multiblok aanpak. Bij deze aanpak wordt de geometrie opgesplitst in een aantal blokken c.q. domeinen. Hierdoor wordt zowel het geheugengebruik als de reketijd op supercomputers verminderd. De reketijd op scalaire computers zal niet verminderen, omdat de huidige TRISULA code op deze computers alleen in actieve punten bewerkingen uitvoert. Voor de multi-blok aanpak is een ruwe schatting gemaakt voor de reductie in reketijd die bij het RIJMAMO model te behalen is. Dit onderzoek is nog gaande en er zijn nog geen resultaten beschikbaar. Een behoorlijke reductie lijkt haalbaar voor het RIJMAMO model, omdat het percentage van actieve roosterpunten aanzienlijk verhoogd kan worden.

Tabel 9	Verhouding in reketijden
Inverse LGRID	2
Multi-blok	3.5

In de bovenstaande tabellen zijn verhoudingen in reketijden weergegeven. De winstfactor in reketijd wordt verkregen door de factoren uit de betreffende tabellen te vermenigvuldigen. Bijvoorbeeld, een 3D Keeten Volkerak model met tien lagen in de vertikaal voor de AOI methode + multi-blok aanpak op de CRAY C90 is een factor $3.5 \times 3.5 \times 10 = 122.5$ sneller dan de ADI methode op de HP 735! Hierbij wordt opgemerkt dat de winstfactoren met de nodige voorzichtigheid beschouwd dienen te worden, omdat in de tabellen schattingen zijn opgenomen.

Tenslotte zullen we het geheugengebruik beschouwen. Bijna alle numerieke technieken die in dit rapport beschreven zijn, leiden niet tot een reductie van het geheugengebruik. Alleen met de multiblok aanpak uit de vorige paragraaf is een geheugenbesparing mogelijk. Voor een 3D RIJMAMO model is naar inschatting een reductie met een factor 3.5 mogelijk, wat in overeenkomst is met de winst in rektijd (zie Tabel 9). Over de multiblok techniek zal in de nabije toekomst gerapporteerd worden.

7 Rekentijden en geheugengebruik voor een 3D RIJMAMO model

In deze paragraaf zullen schattingen gegeven worden voor zowel de rekentijd als het geheugengebruik voor een 3D RIJMAMO model met tien lagen in de vertikaal. Er wordt onderscheid gemaakt tussen een model zonder en een model met stoftransport (alleen saliniteit). De rekentijden voor een HP 735 worden beschouwd. Ter aanvulling zullen ook de resultaten voor een 2D RIJMAMO model gegeven worden. Tabel 10 bevat gemeten rekentijden voor het 2D model, terwijl Tabel 11 schattingen bevat voor een 10 lagen model. Het feit dat we slechts schattingen voor het 3D model geven is te wijten aan de te geringe geheugen-capaciteit van de huidige computers. De vereenvoudigingen die in dit rapport beschreven zijn, zijn niet meegenomen in Tabel 10 en 11. De tabellen bevatten rekentijden voor een simulatieperiode van één dag. We merken op dat in deze tabellen rekentijden en geen doorlooptijden worden gegeven. Tussen haakjes staat de benodigde geheugencapaciteit vermeld voor werkstations (in megabytes).

Tabel 10 (2D model)	Geen stoftransport	Wel stoftransport
ADI methode	2976 sec	5184 sec
AOI methode	5280 sec	6792 sec
(configuratie)	(40 MB)	(44 MB)

Tabel 11 (3D model)	Geen stoftransport	Wel stoftransport
ADI methode	29.800 sec	51.800 sec
AOI methode	27.000 sec	42.600 sec
(configuratie)	(192 MB)	(228 MB)

Het feit dat het stoftransportdeel een behoorlijke toename in rekentijd oplevert, wordt veroorzaakt door de relatief grote tijdstap (het courantgetal is 25). Het Jacobi-iteratieproces is de transportroutine vereist daardoor vrij veel iteraties en dus vrij veel rekentijd.

Voor de ADI methode zijn de rekentijden voor een tien lagen model in het algemeen tien keer zo hoog als bij een één laag model. Dit geldt niet voor de AOI methode. Deze methode is relatief duur voor een 2D model. De AOI methode wordt relatief efficiënter als het aantal lagen in de vertikaal toeneemt. Voor een tien lagen model zonder stoftransport zal de AOI methode naar inschatting iets lagere rekentijden opleveren dan de ADI methode. Per tijdstap is de AOI methode bijna twee keer zo duur. De tijdstap kan echter twee keer zo groot gekozen worden. Indien stoftransport wordt meegenomen, dan zal een het verschil groter zijn vanwege de grotere tijdstap voor de AOI methode. Deze methode heeft verder als voordeel dat de numerieke resultaten naar verwachting nauwkeuriger zullen zijn. Bovendien wordt er momenteel een multiblok-versie voor de AOI methode ontwikkeld. Verdere conclu-

sies kunnen pas getrokken worden als het multiblok onderzoek voltooid is.

Aangezien supercomputers in het algemeen rekenen in 64 bits precisie, dient voor deze computers de benodigde geheugengebruik verdubbeld te worden. Een 10 lagen RIJMAMO model op de CRAY vereist ongeveer 440 MB (= 55 MW(megawoorden)). Omdat de CRAY van Icim over een snel toegankelijk geheugen van 32 MW beschikt, is vijf lagen het maximale aantal voor het RIJMAMO model. Hierbij is aangenomen dat het testprobleem in het snel toegankelijke deel van het geheugen moet passen.

8 Conclusies

Voor de huidige TRISULA code is een vereenvoudigd numeriek schema ontwikkeld. Er is onderzocht in hoeverre de rekestijden en de nauwkeurigheid veranderen ten gevolge van de vereenvoudigingen. Het blijkt dat verschillende vereenvoudigingen moeten worden toegepast om een behoorlijke reductie in rekestijd te verkrijgen. Een vereenvoudiging van alleen het numerieke schema is niet voldoende. Het berekenen van bijvoorbeeld de coëfficiënten voor de bodemwrijving, viscositeit en diffusie vergt eveneens een behoorlijke rekeninspanning. Dit gedeelte dient dus ook vereenvoudigd te worden. Na toepassing van een aantal extra vereenvoudigingen blijken de rekestijden voor het vereenvoudigde schema een factor drie lager te zijn dan voor de standaard TRISULA versie. Deze reductiefactor wordt zowel op de HP 735 als op de CRAY Y-MP verkregen. Hierbij kan worden opgemerkt dat de CRAY Y-MP vier keer zo snel is als de HP 735.

Voor zowel 2D als 3D testproblemen is de nauwkeurigheid van het vereenvoudigde schema onderzocht. Het verlies van nauwkeurigheid verschilt per testprobleem. In het algemeen blijkt de nauwkeurigheid in globale zin acceptabel te zijn. Lokaal kunnen er grote verschillen optreden. Het vereenvoudigde schema dient daarom met de nodige voorzichtigheid toegepast te worden. Per testprobleem zal onderzocht moeten worden of de toegepaste vereenvoudigingen toegestaan zijn.

De vereenvoudigingen zijn in eerste instantie getest voor de huidige numerieke methode in TRISULA, te weten een ADI methode. Deze vereenvoudigingen kunnen ook toegepast worden voor een Alternating Operator Implicit (AOI) methode. Deze methode is momenteel als researchversie bij het WL beschikbaar. Voor de AOI methode leveren de vereenvoudigingen wederom een reductiefactor van drie op. Voor een 3D Keeten Volkerak testprobleem met tien lagen in de vertikaal is de rekestijd voor de vereenvoudigde AOI methode een factor tien kleiner dan voor de huidige (ADI) methode in TRISULA. Hierbij levert de AOI methode een reductiefactor van 3.8 en de vereenvoudigingen een factor 2.5.

Voor een 3D RIJMAMO model met tien lagen in de vertikaal zal de AOI methode naar inschatting iets lagere rekestijden opleveren dan de ADI methode (zie paragraaf 7). Het grote courantgetal bij de ADI methode, te weten 25, verhindert dat voor dit model de AOI methode tot veel lagere rekestijden leidt. Beide methoden kunnen versneld worden met de vereenvoudigingen die in dit rapport beschreven zijn. Tevens wordt er momenteel een multiblok-versie ontwikkeld voor de AOI methode. Gezien de benodigde rekestijd en geheugenruimte lijkt de AOI methode gecombineerd met de multiblok aanpak de beste keuze voor een 3D RIJMAMO model met tien lagen in de vertikaal.

9 Referenties

- Mooiman J. en E.D de Goede, 1993: Een Alternating Operator Implicit (AOI) methode voor TRISULA. Waterloopkundig Laboratorium, rapport Z698.
- SARA rekencentrum, 1993: Optimalisatie op de CRAY Y-MP4/464.
- Stelling, G.S., 1991: Uniformering van WAQUA-rekenroutines inclusief droogvallen en weer onderlopen. Waterloopkundig Laboratorium, rapport Z266.
- Van Kester, J.A.Th.M. en G.S. Stelling, 1992: Versnellen van TRISULA-3D. Waterloopkundig Laboratorium, rapport Z81.
- Waterloopkundig Laboratorium, 1987: Manukau Harbour Dispersion Modelling. prepared for Auckland Regional Authority, report Z226.
- Waterloopkundig Laboratorium, 1993a: TRISULA, a simulation program for hydrodynamic flows and transports in 2 and 3 dimensions.
- Waterloopkundig Laboratorium, 1993b: Opzet en afregeling TRISULA model RIJAMO.
- Waterloopkundig Laboratorium, 1993c: Segara Anakan, Indonesia, Conservation and development project.

Appendix A: Beschrijving van TRISULA routines

CUCNP	:	stelt vergelijkingen op voor een bewegingsvergelijking
DIFU	:	berekent transport van opgeloste stoffen
DIHTUR	:	berekent horizontale diffusie
SUD	:	berekent waterstanden, snelheden in verticale richting en snelheden in x- of y-richting
TAUBOT	:	berekent bodemwrijving
UZO	:	berekent snelheden in de andere x- of y-richting (vgl. SUD)
VICOM	:	berekent viscositeit en diffusie in verticale richting
VIHTUR	:	berekent horizontale schuifspanningsterm

trim-021.dat 021 930607 135802



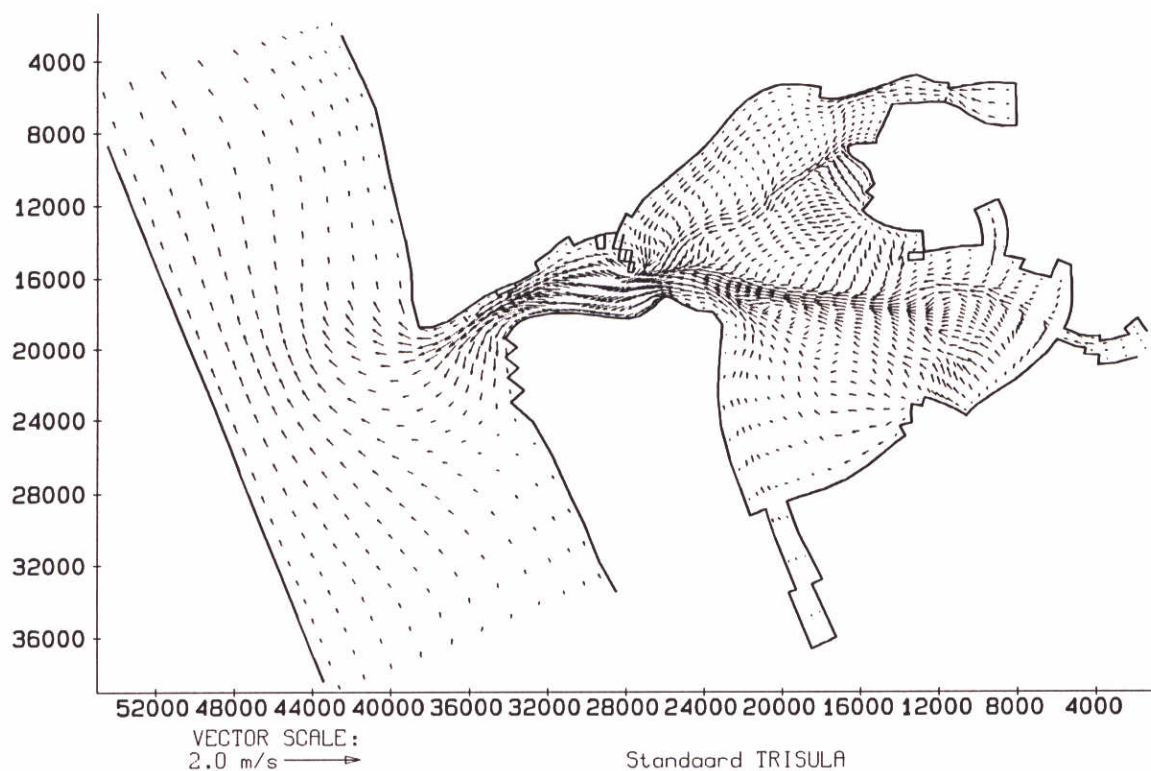
Geometrie voor Manukau

1993-09-30
12:03:43

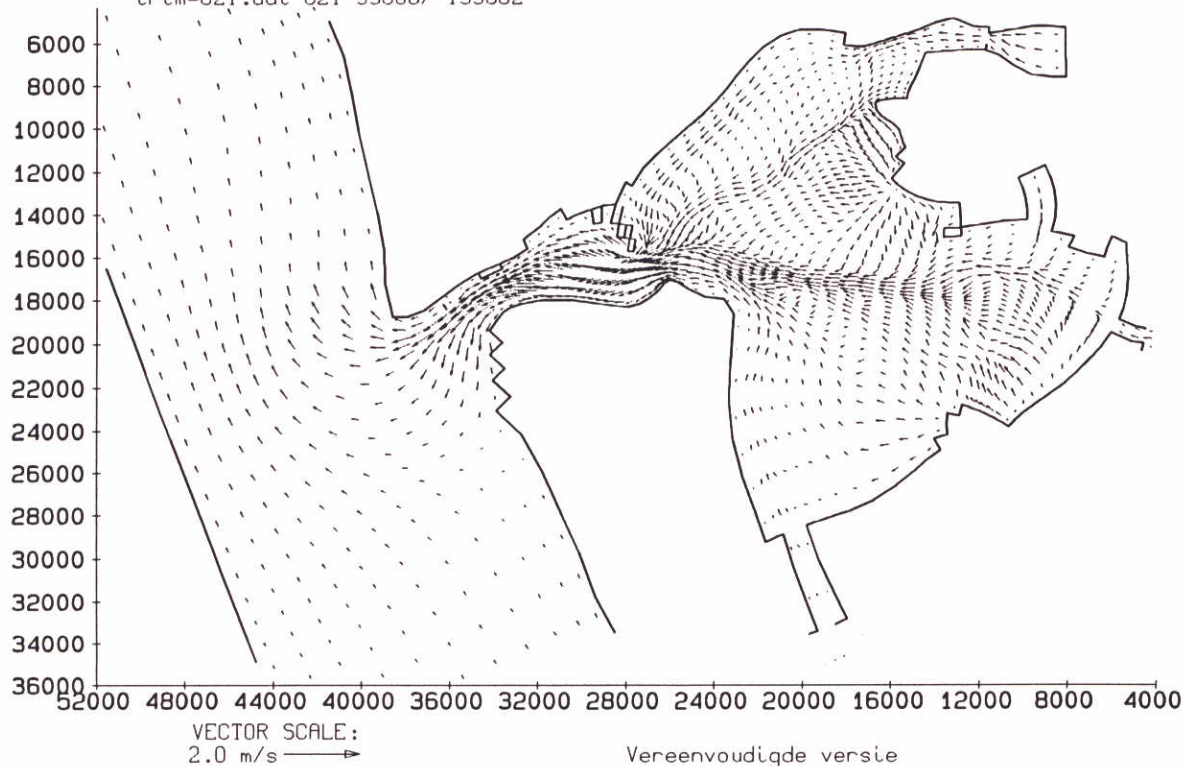
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig1

trim-021.dat 021 930607 135802



trim-921.dat 921 930607 152025
trim-021.dat 021 930607 135802



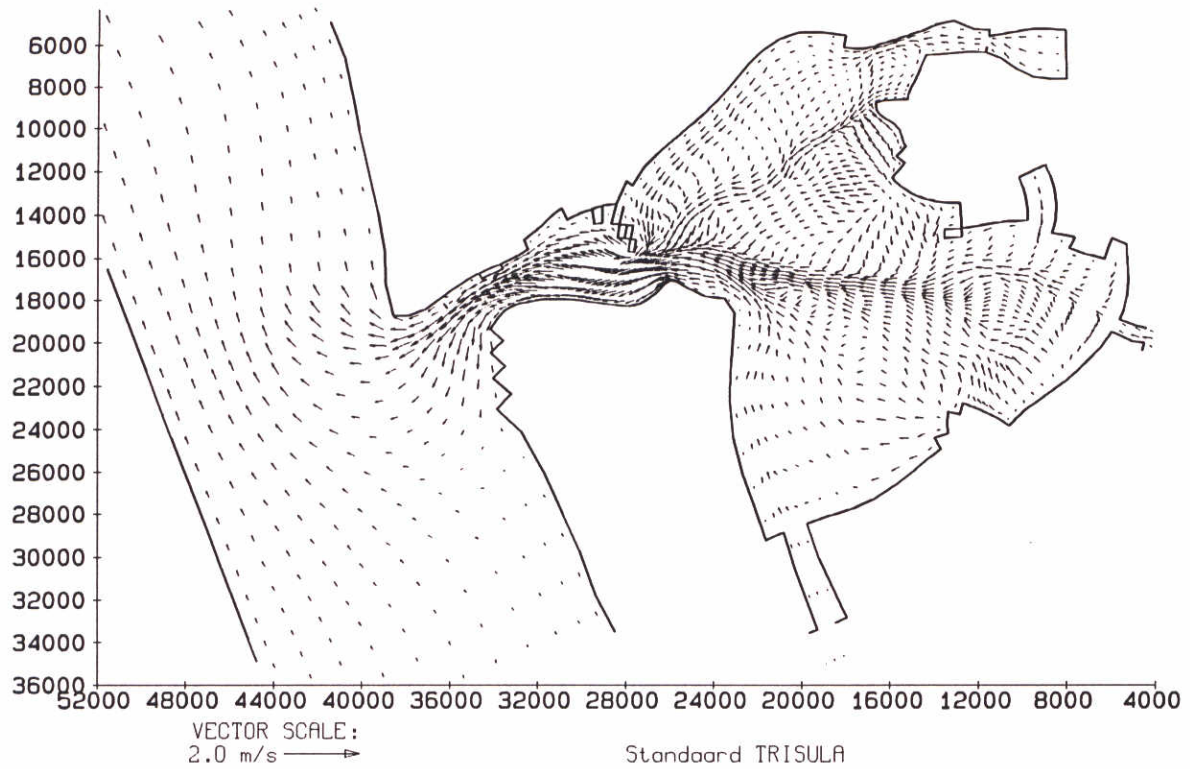
Vectorplots voor Manukau
snelheden op t=1500 min.
2D model

1993-09-30
12:04:07

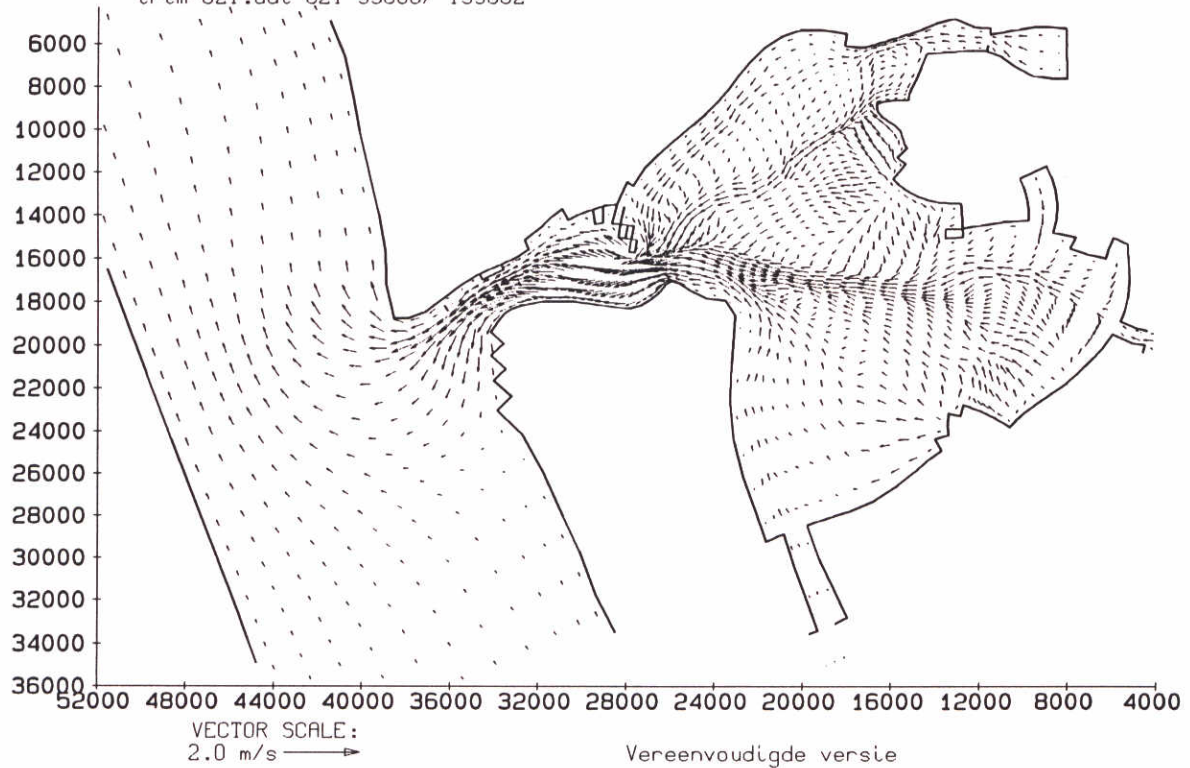
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig2

trim-021.dat 021 930607 135802



trim-921.dat 921 930607 152025
trim-021.dat 021 930607 135802

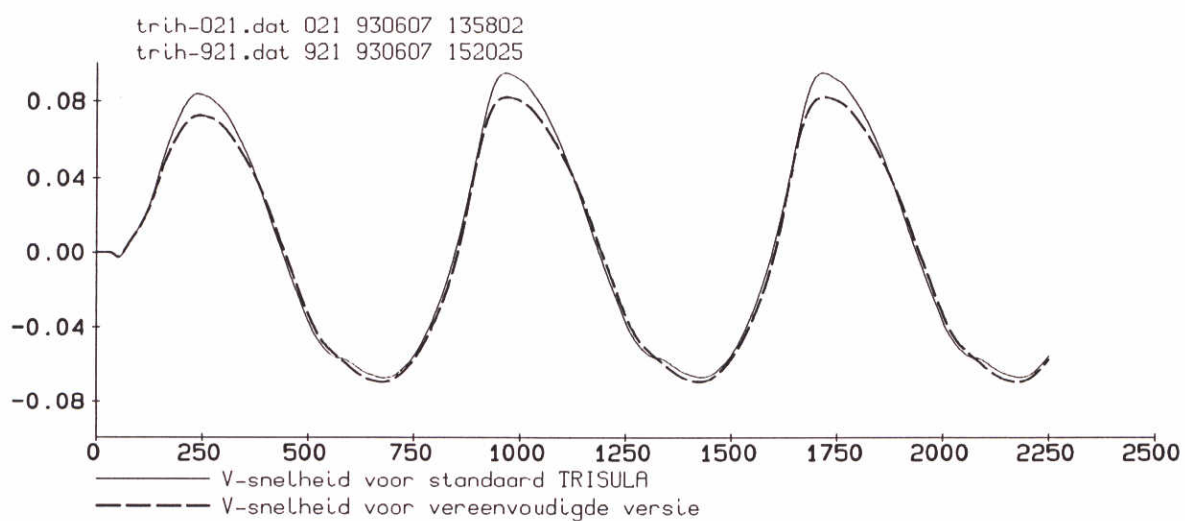
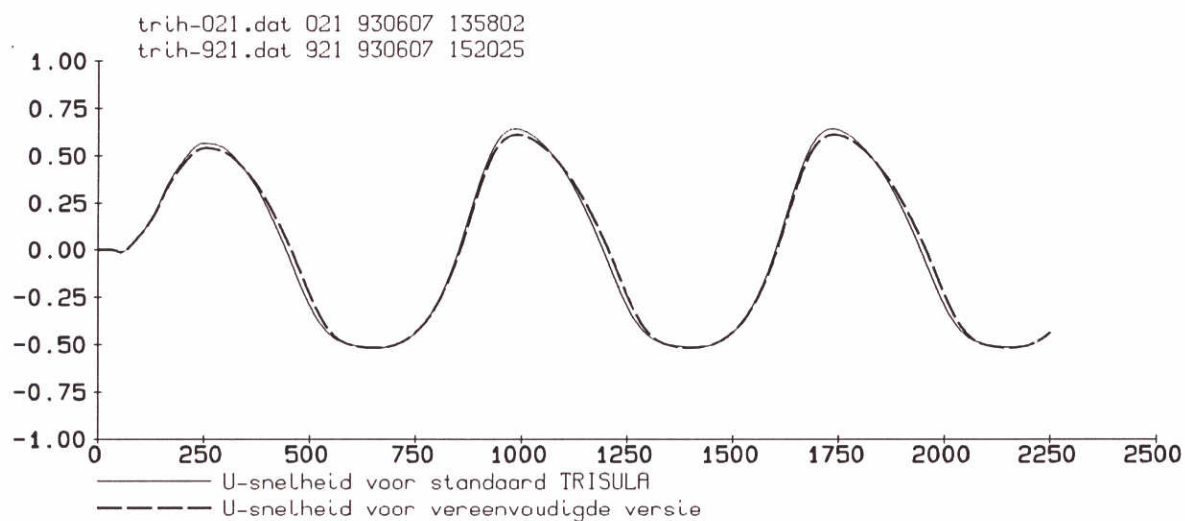
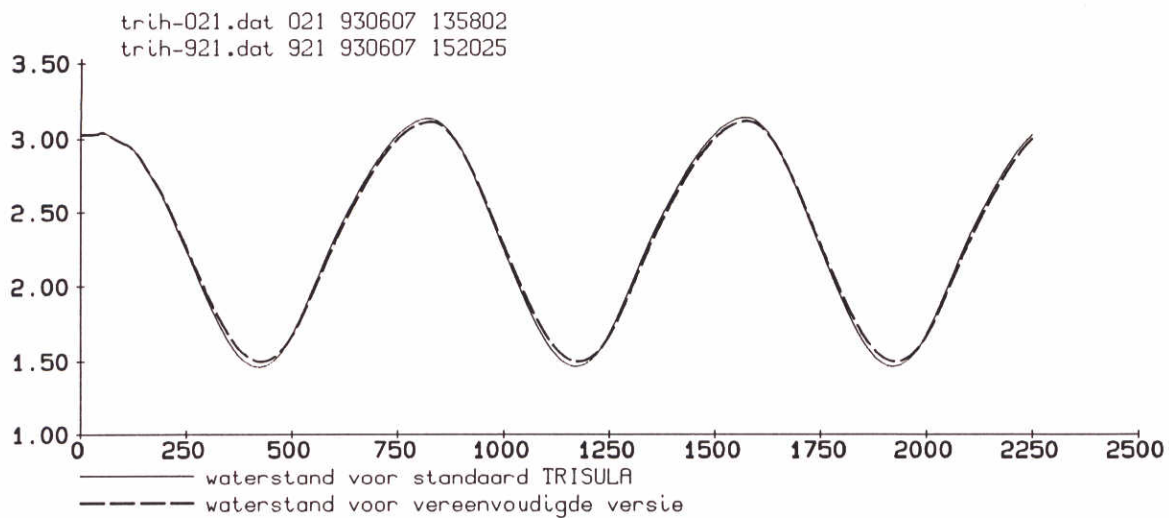


Vectorplots voor Manukau
snelheden op t=2220 min.
2D model

1993-09-30
12:04:39

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig3



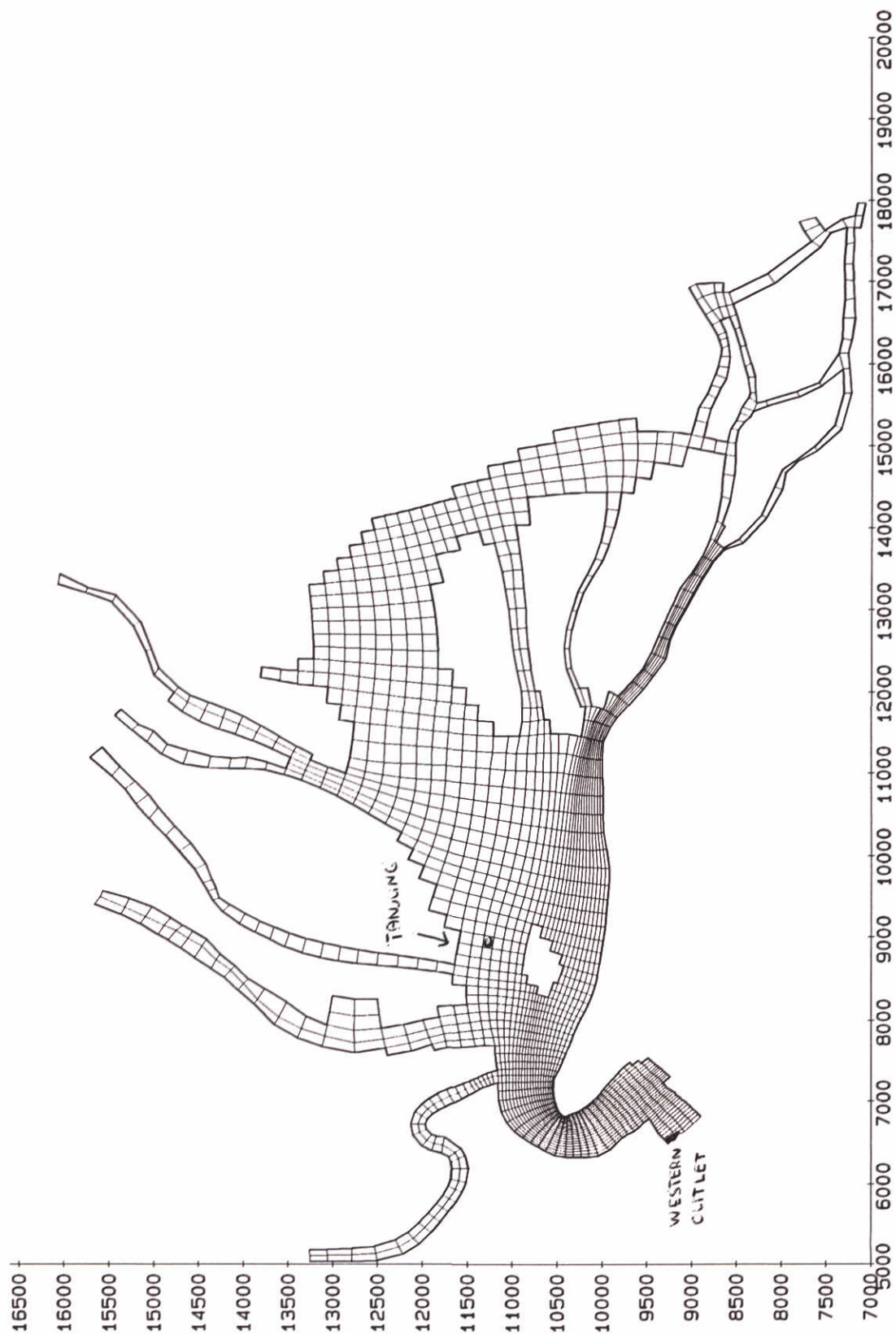
Tijdreeksen voor Manukau
in station "Location second series"
2D model

1993-09-30
12:05:09

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig4

trim-000.dat 000 930615 160413



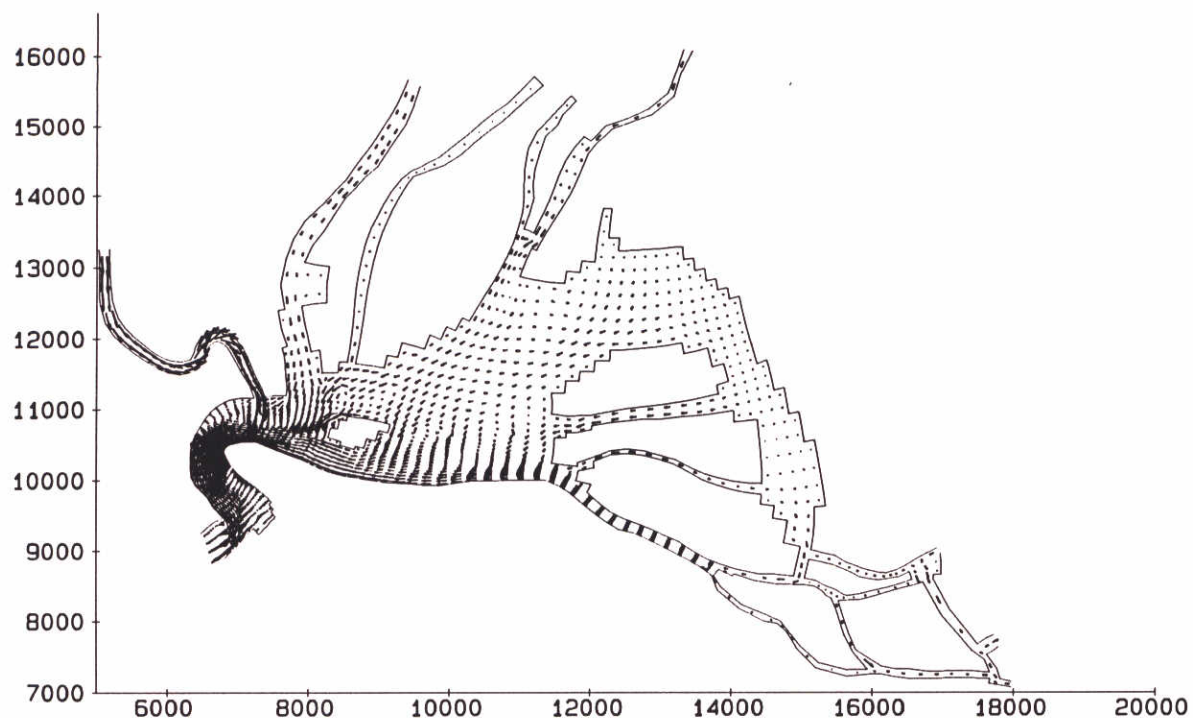
Geometrie voor Segara Anakan

1993-09-30
12:07:23

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig5

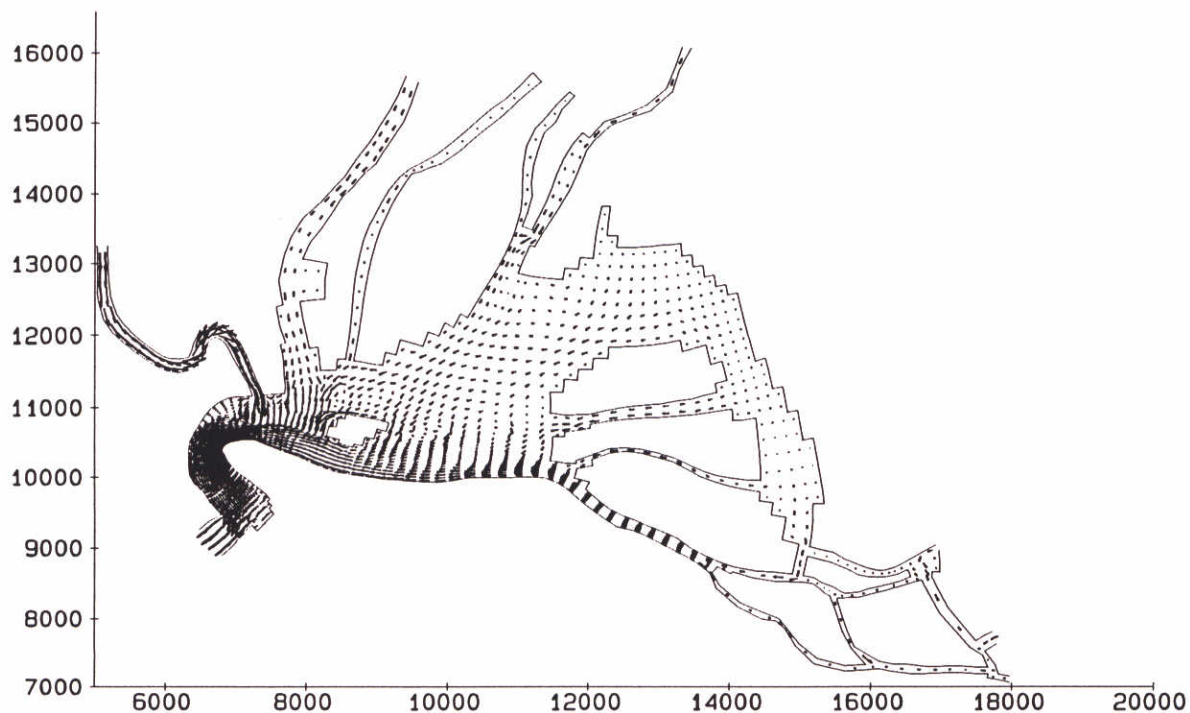
trim-000.dat 000 930615 160413



4.0 m/s →

voor standaard TRISULA

trim-900.dat 900 930616 085621



4.0 m/s →

voor vereenvoudigde versie

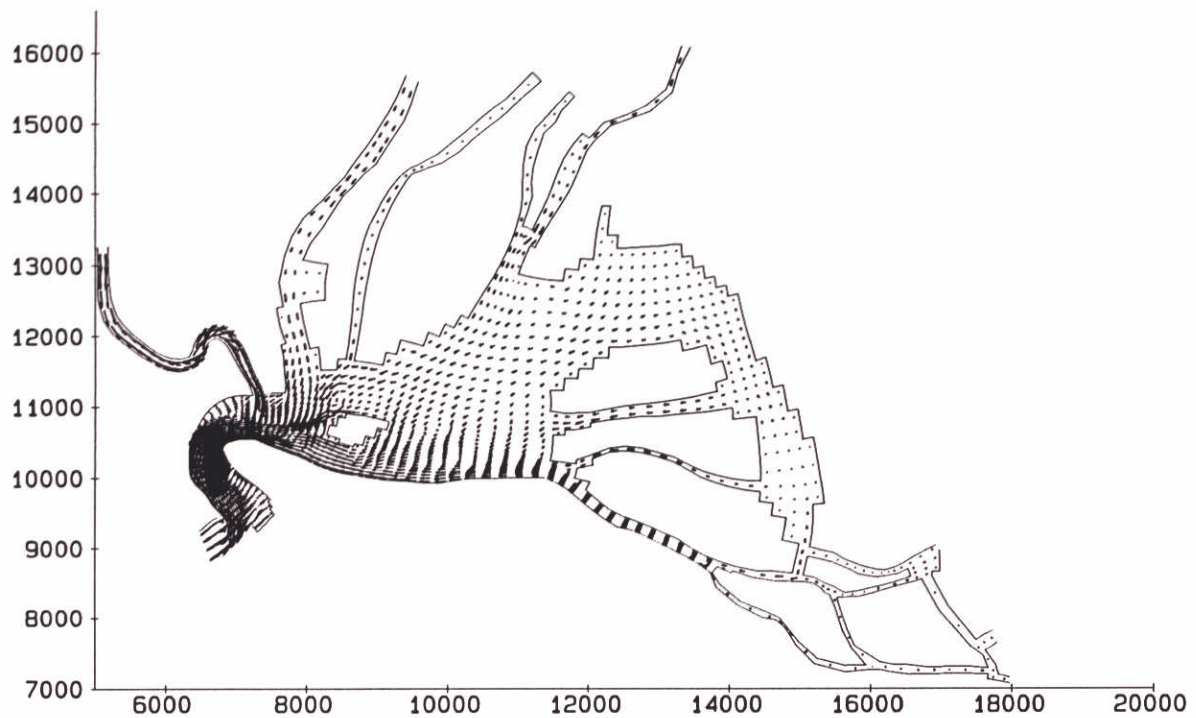
Vector plots voor Segara Anakan
op t=1440 min.

1993-09-30
12:07:48

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig6

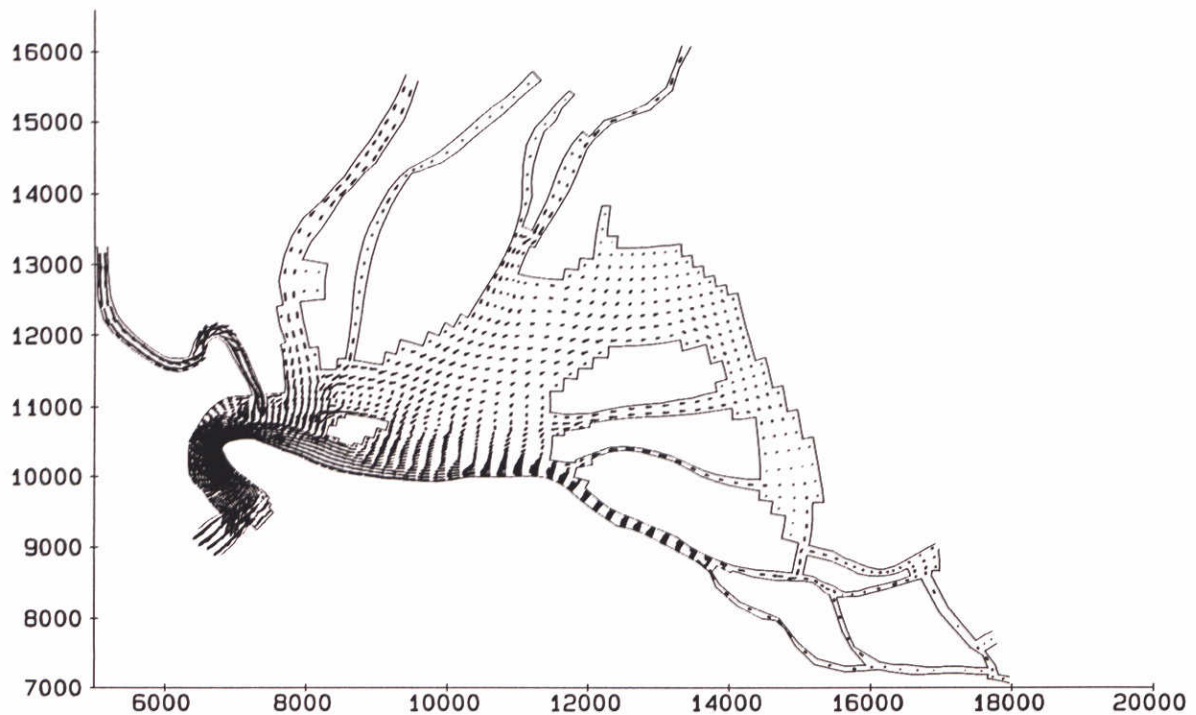
trim-000.dat 000 930615 160413



4.0 m/s →

voor standaard TRISULA

trim-900.dat 900 930616 085621

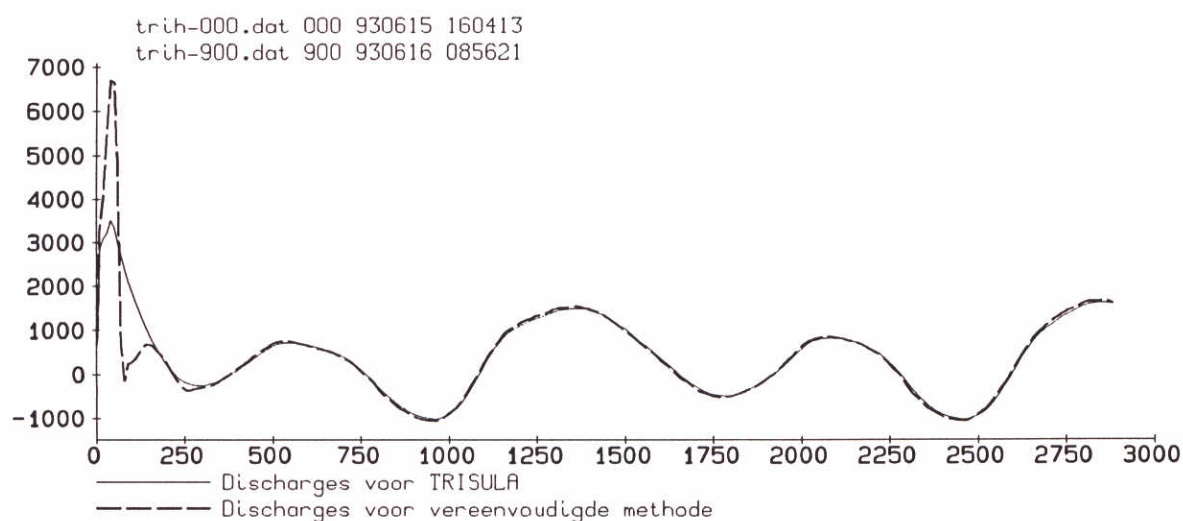
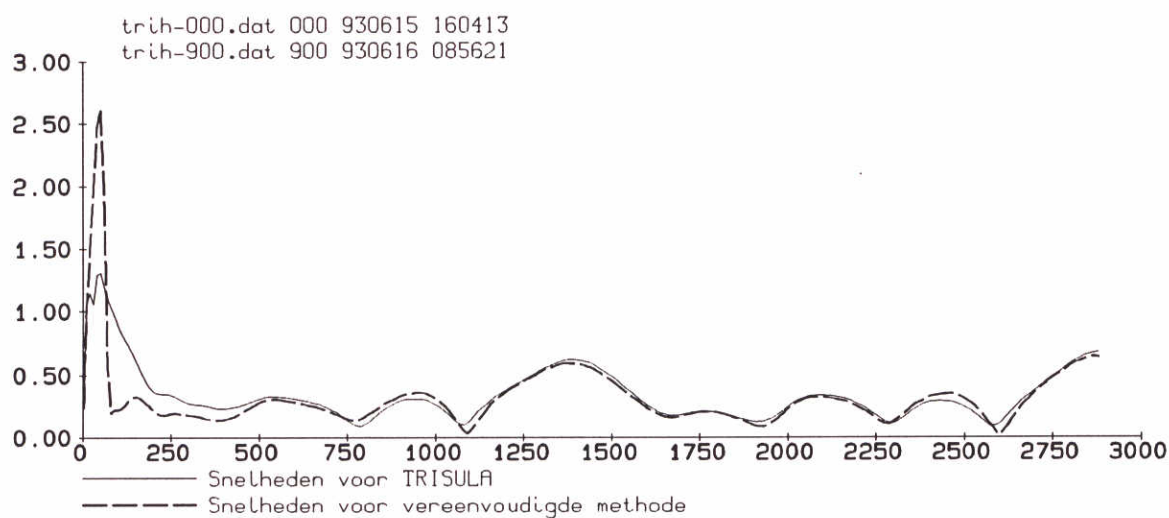
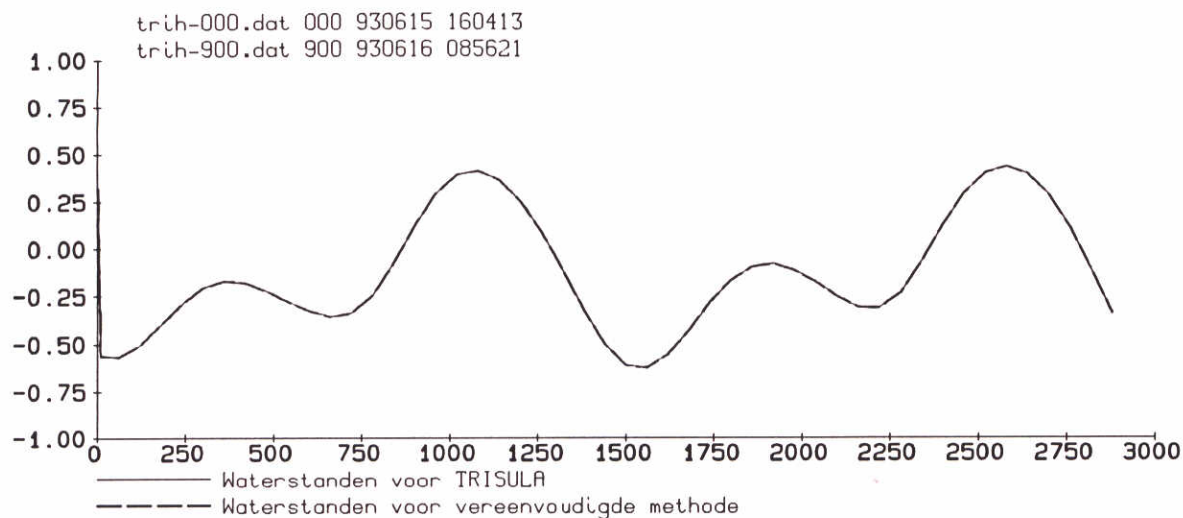


4.0 m/s →

voor vereenvoudigde versie

Vector plots voor Segara Anakan
op t=2880 min.

1993-09-30
12:08:24

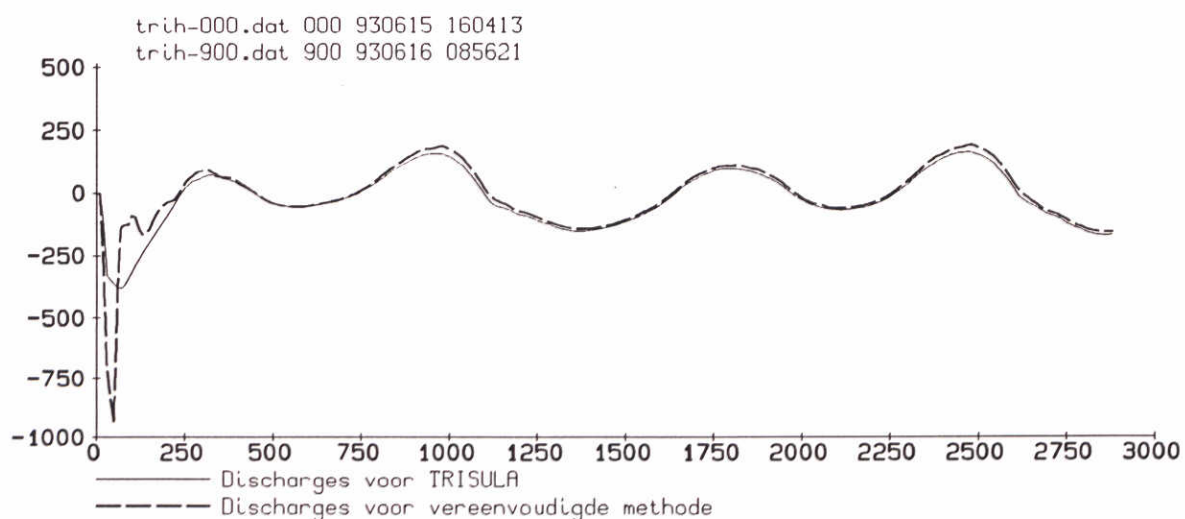
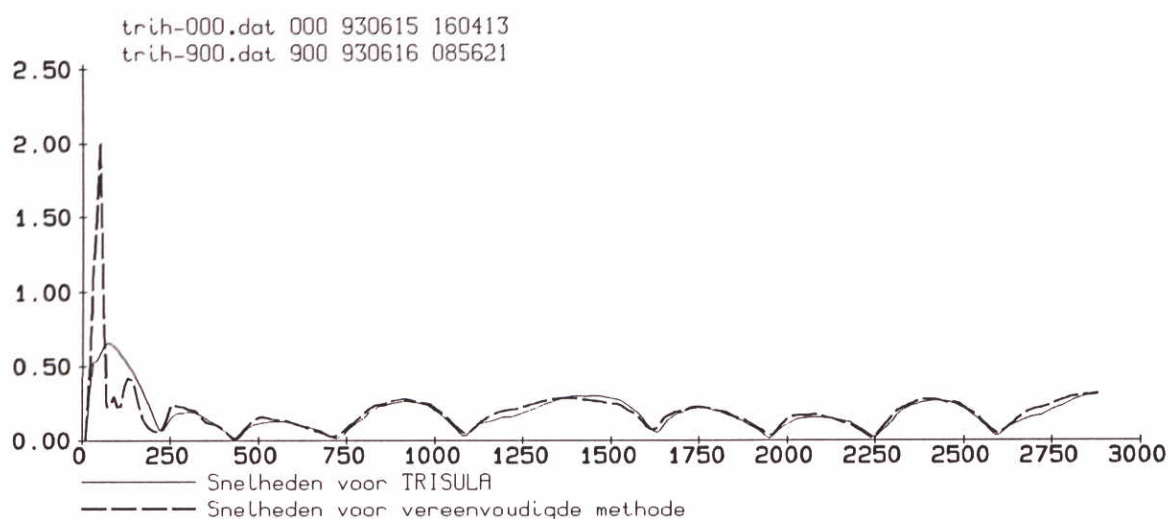
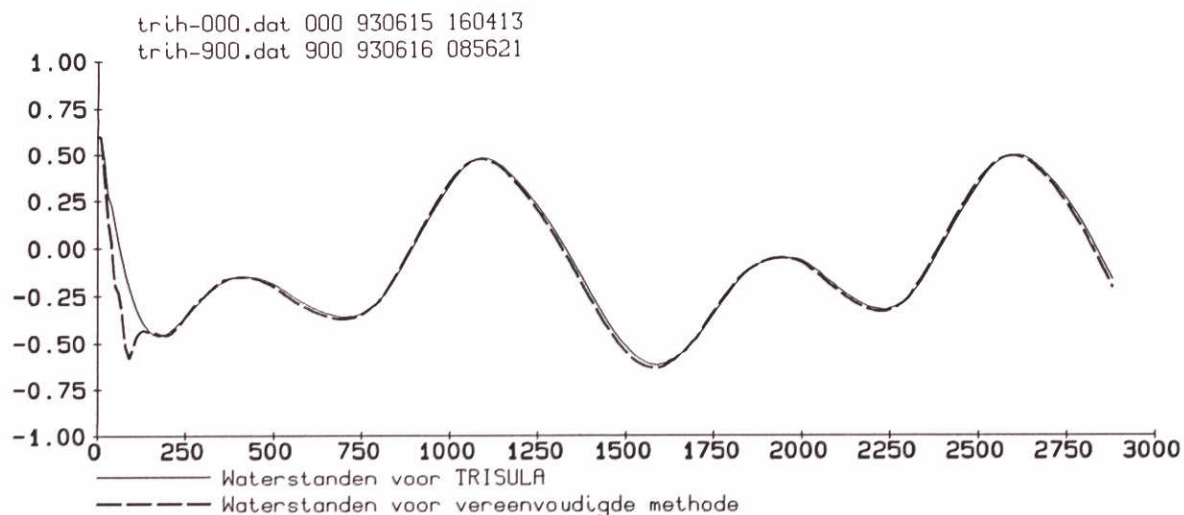


Tijdreeksen voor Segara Anakan
in station Western Outlet
2D model

1993-09-30
12:09:09

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig8

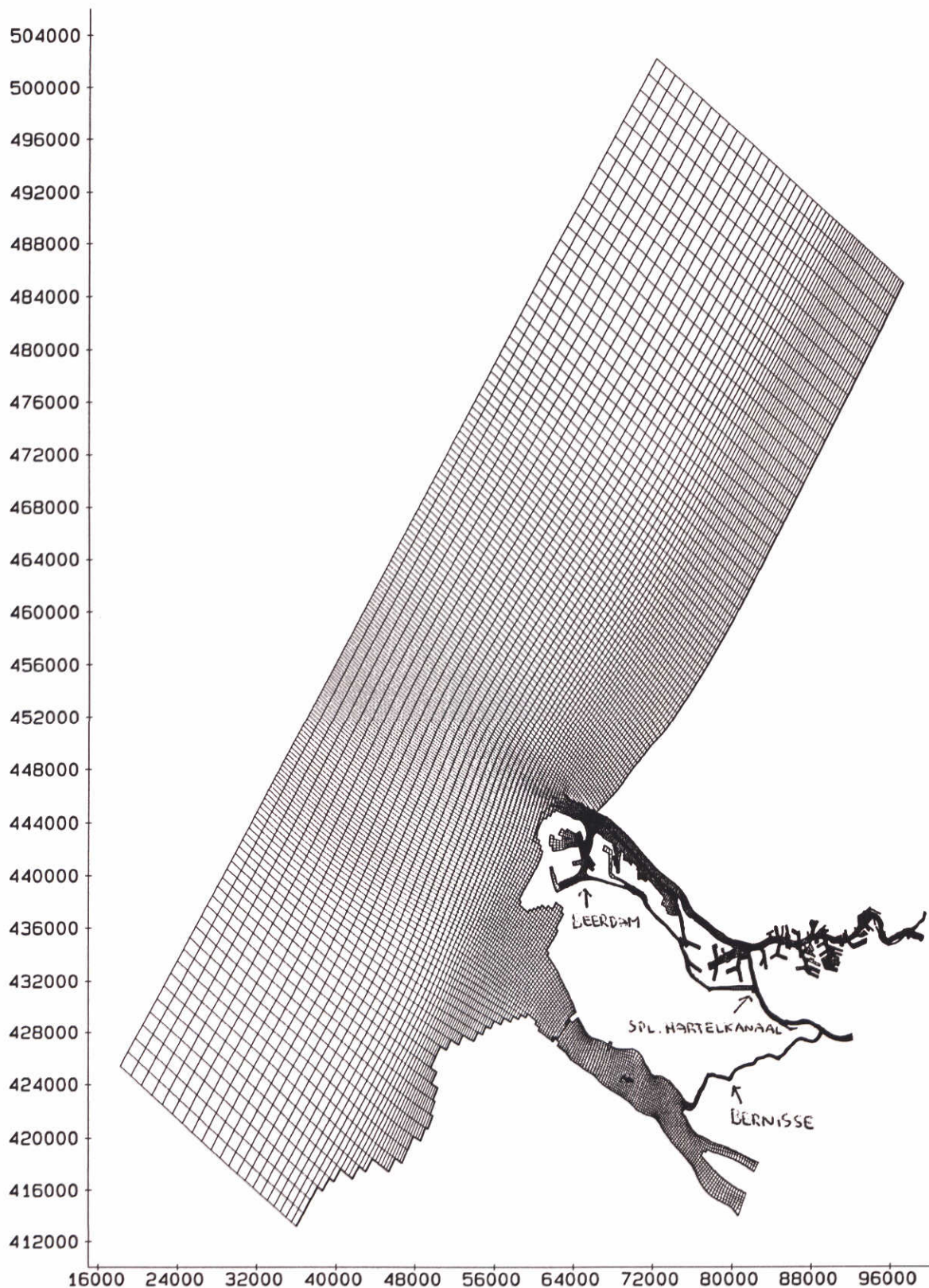


Tijdreeksen voor Segara Anakan
in station Tanjung
2D model

1993-09-30
12:09:23

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig9

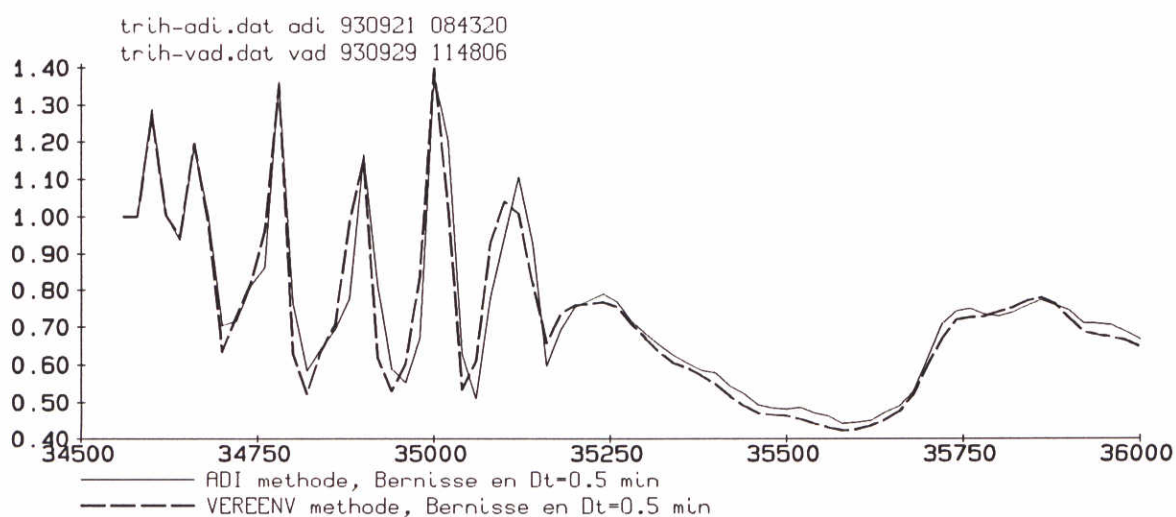
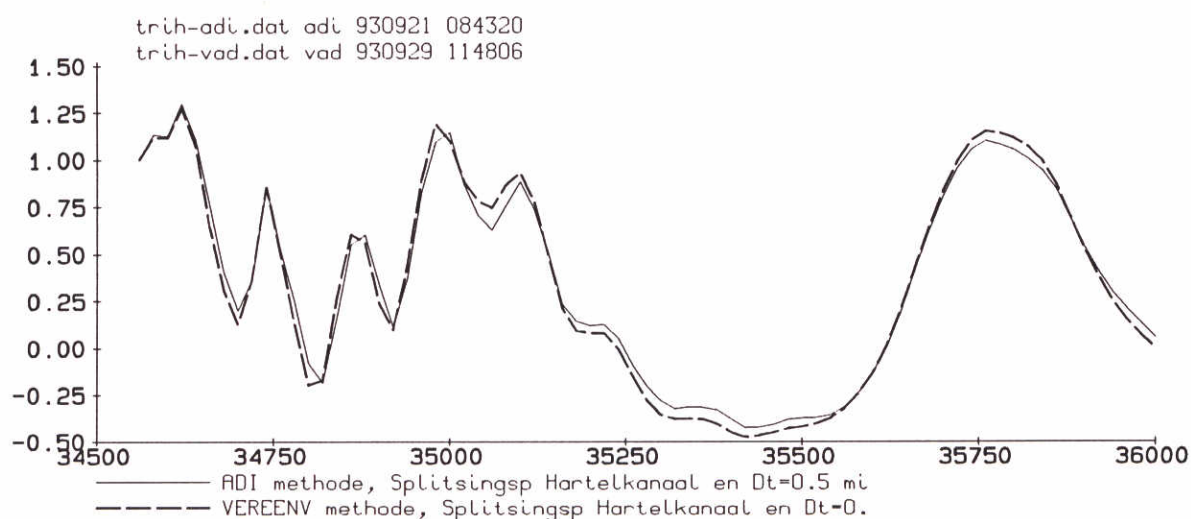
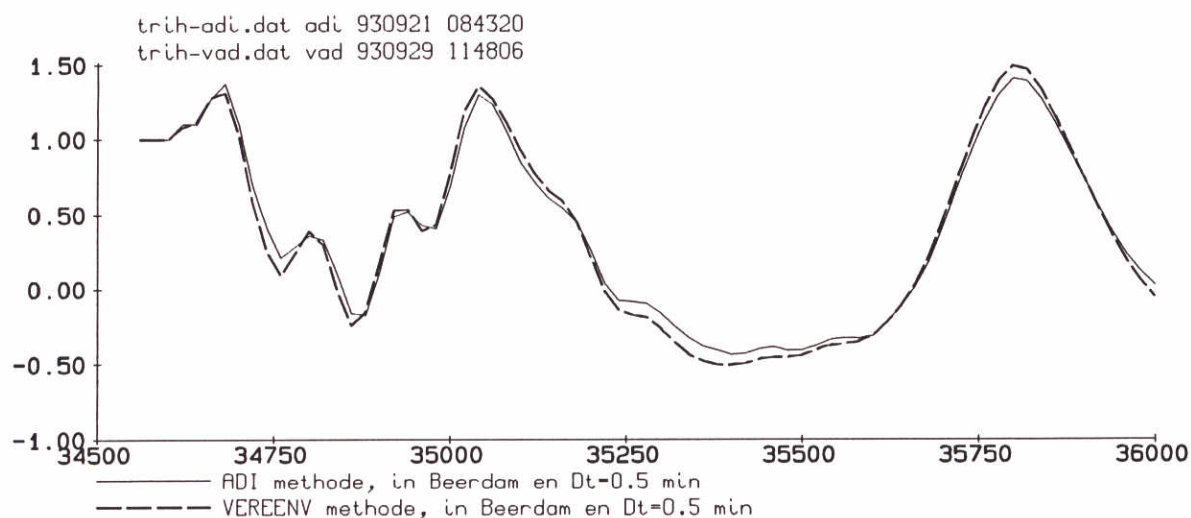


Geometrie voor RIJMAMO

1993-09-30
12:14:00

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig10

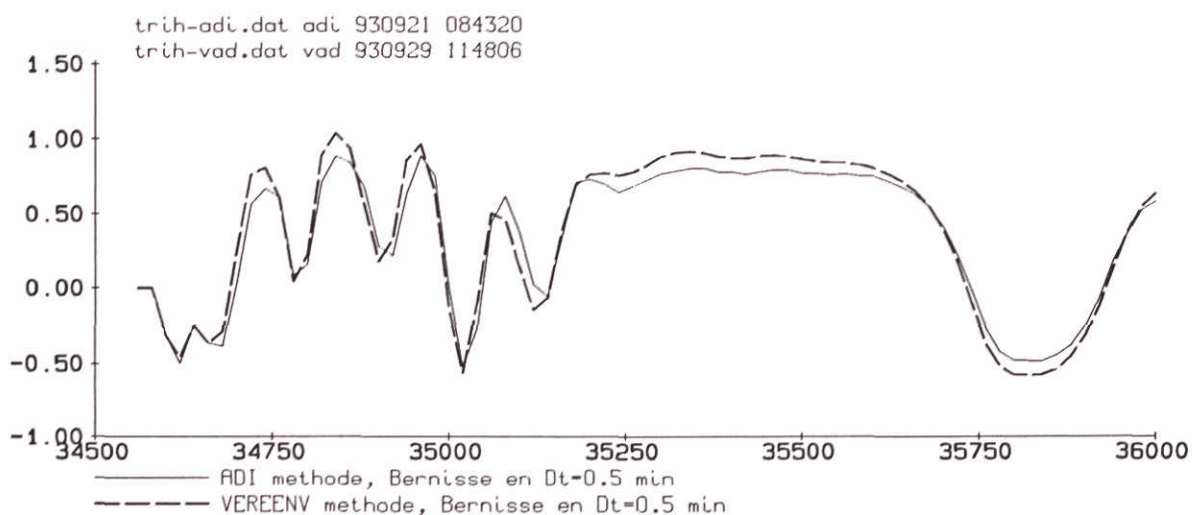
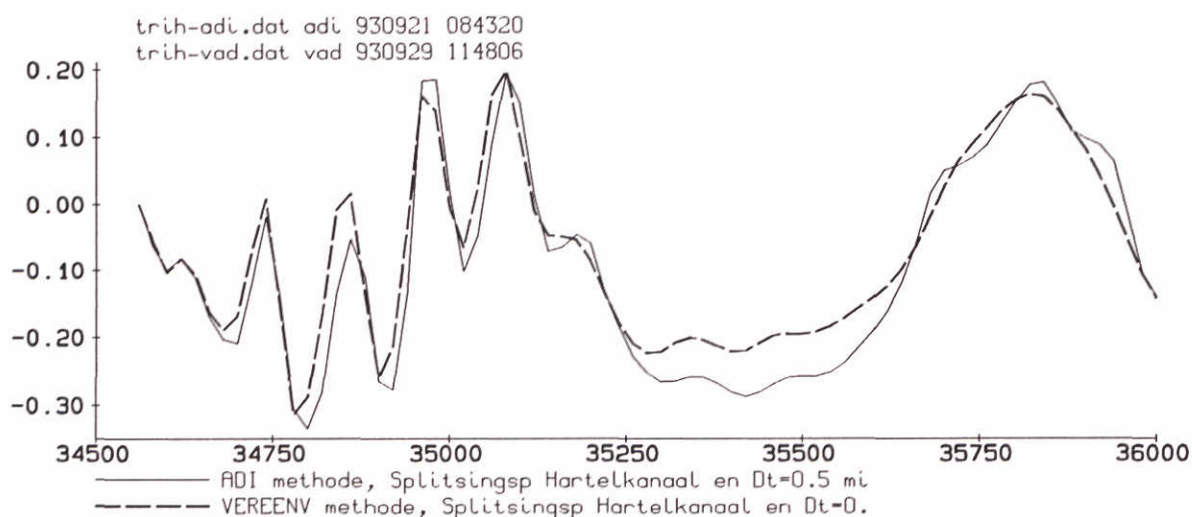
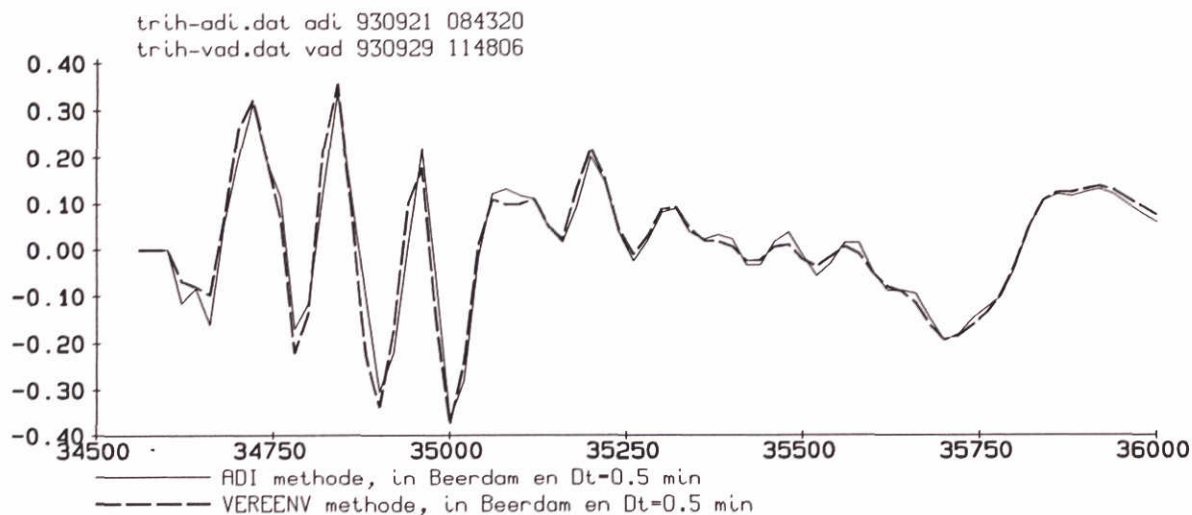


Waterstanden voor RIJMAMO
2D model

1993-09-30
12:17:33

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

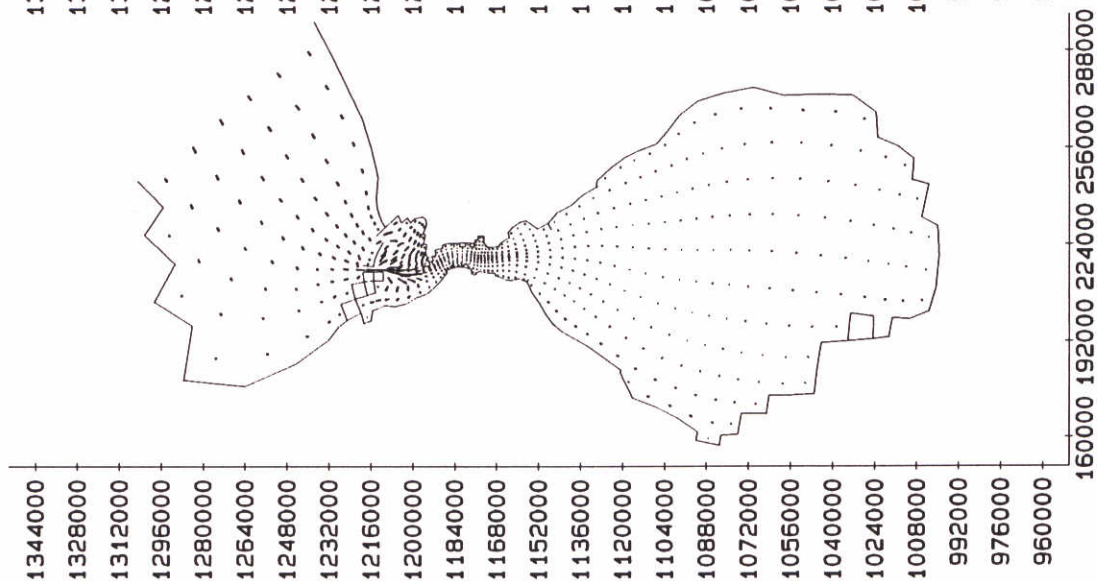
fig11



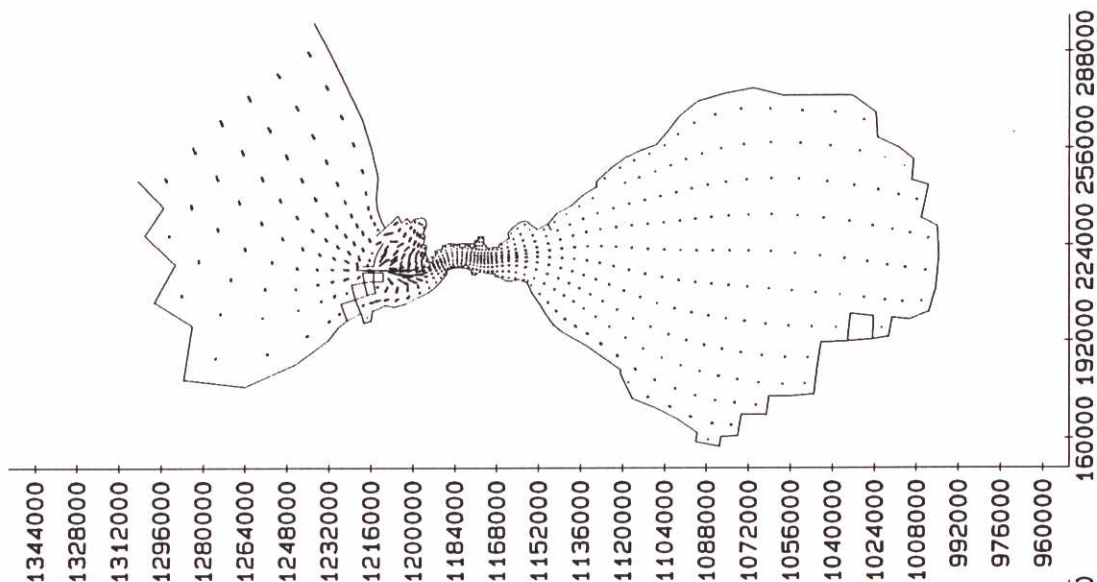
U-snelheden voor RIJMAMO
2D model

1993-09-30
12:18:15

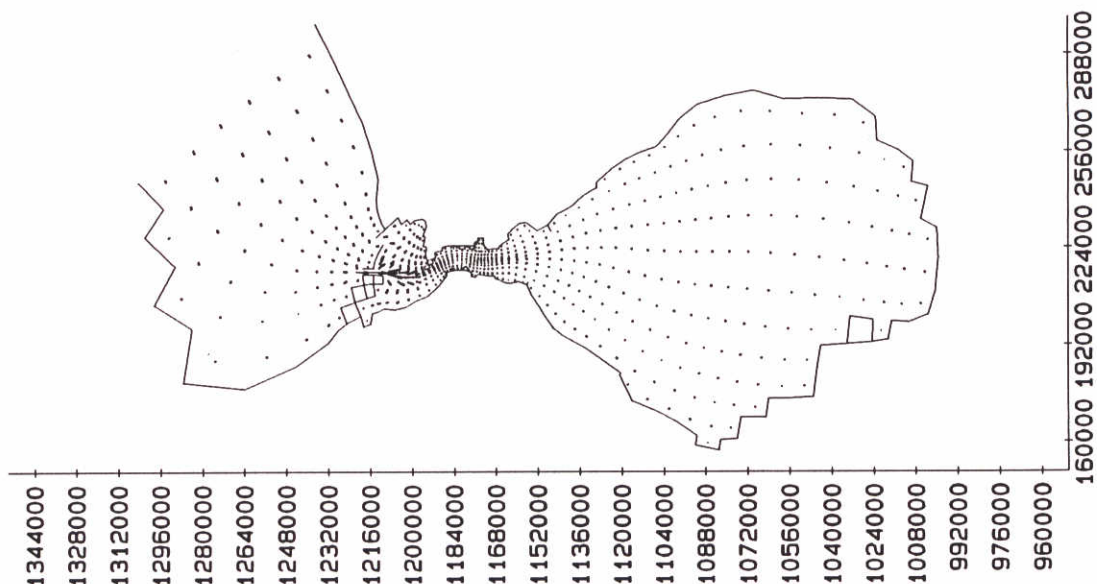
trim-s2q.dat s2q 930621 082145



trim-s2q.dat s2q 930621 082145



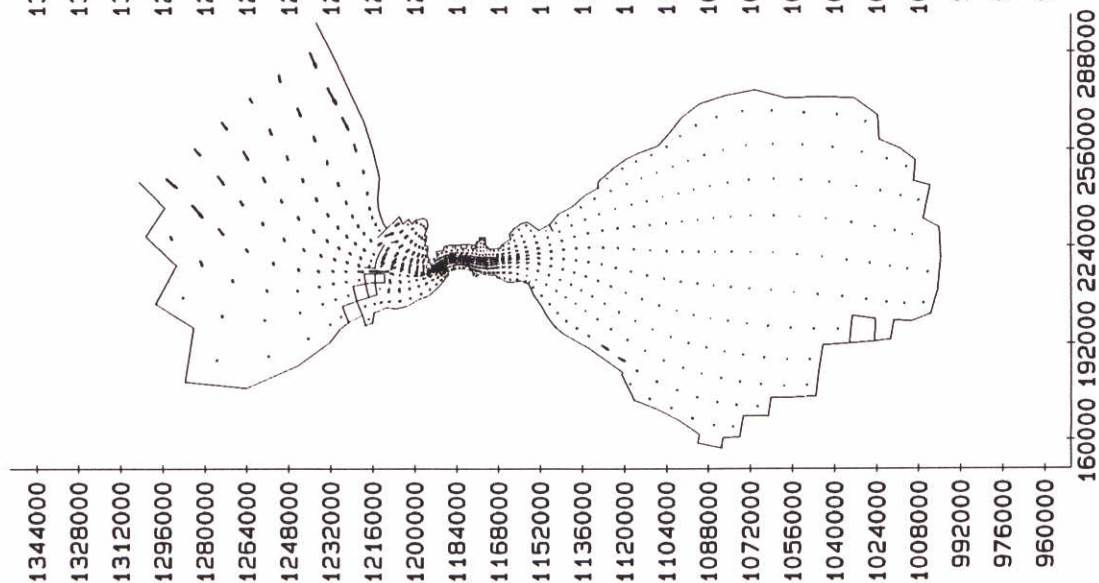
trim-s2q.dat s2q 930621 082145



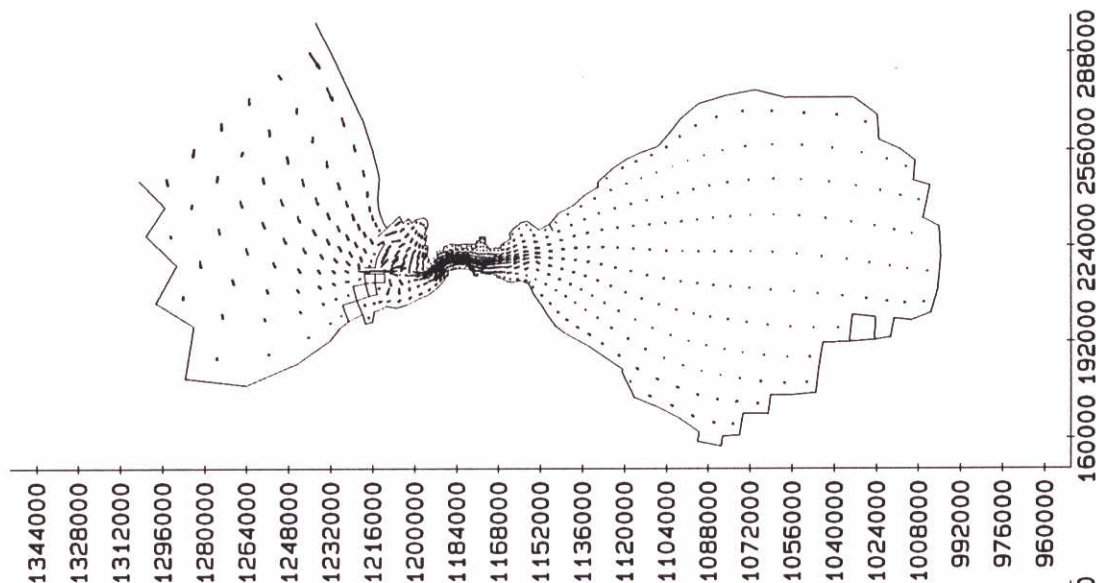
Vectorplots voor Meer van Maracaibo
voor standaard TRISULA
op t=720 min.

1993-09-30
12:26:09

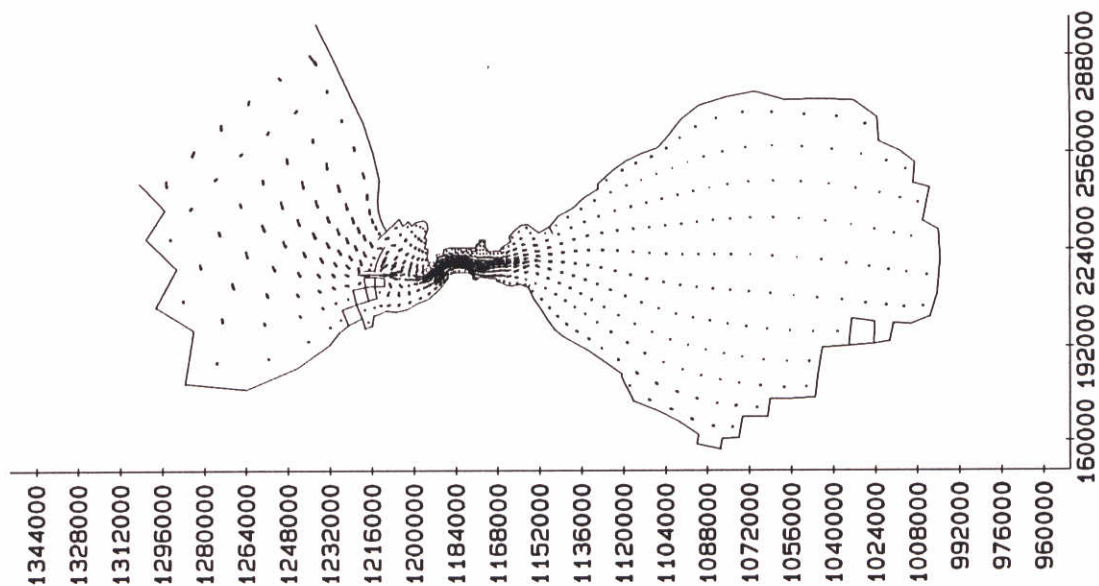
trim-ver.dat ver 930621 084848



trim-ver.dat ver 930621 084848



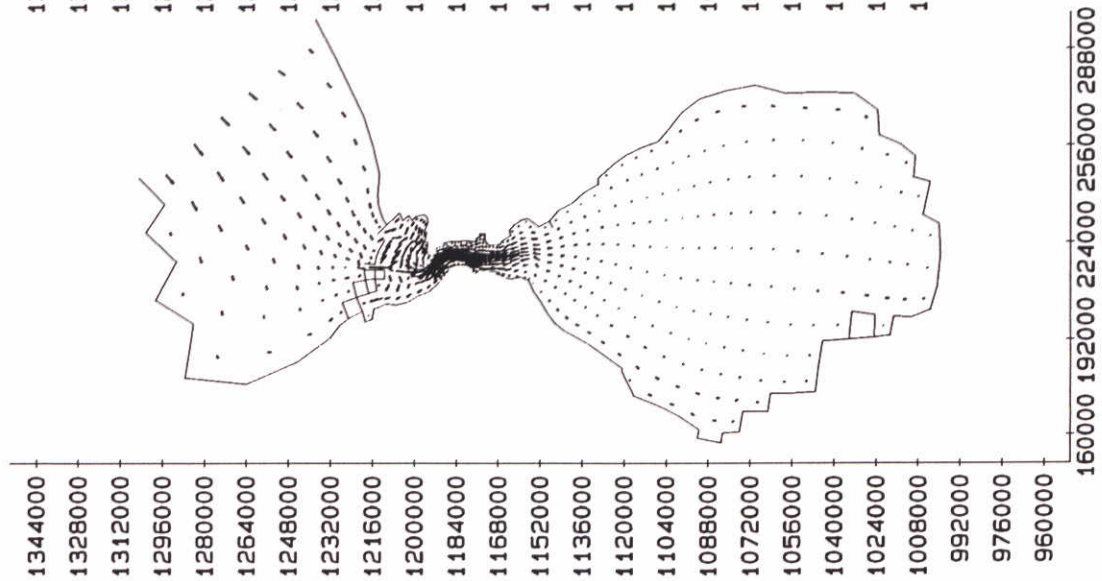
trim-ver.dat ver 930621 084848



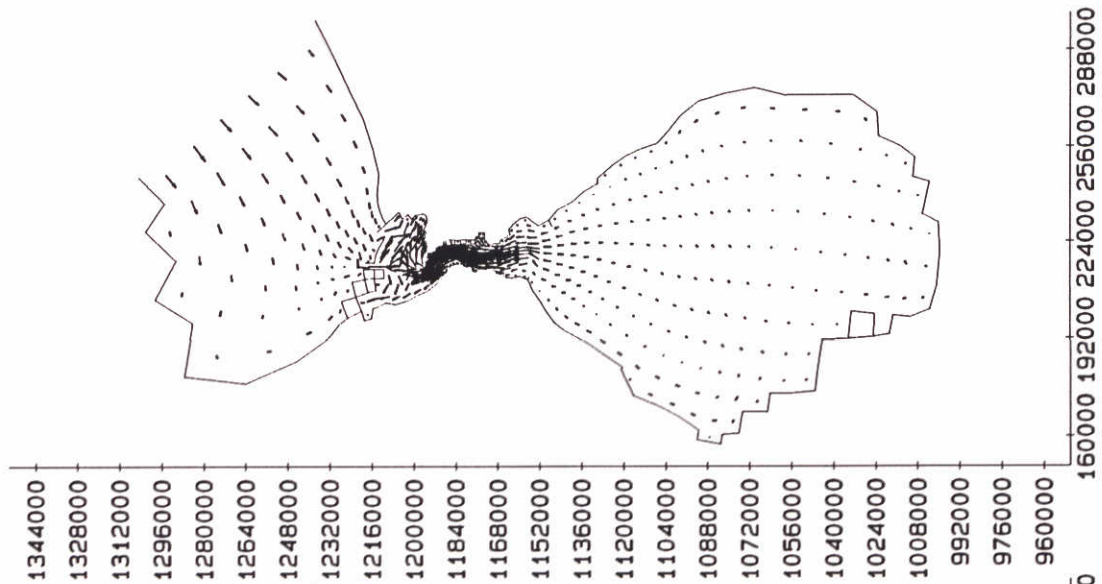
Vectorplots voor Meer van Maracaibo
voor vereenvoudigde versie
op $t=720$ min.

1993-09-30
12:25:42

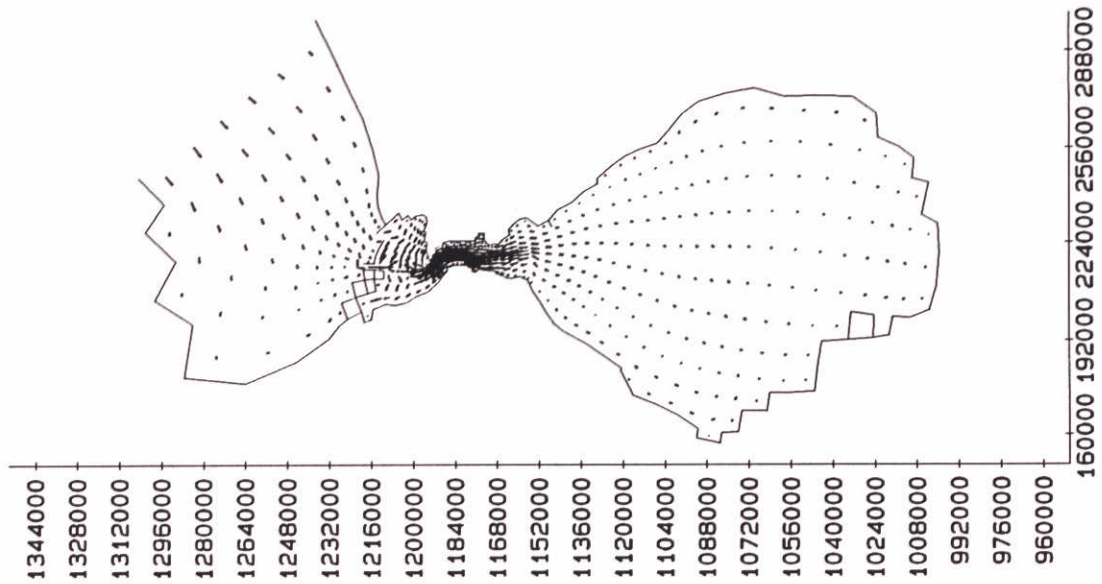
trim-s2q.dot s2q 930621 082145



trim-s2q.dot s2q 930621 082145



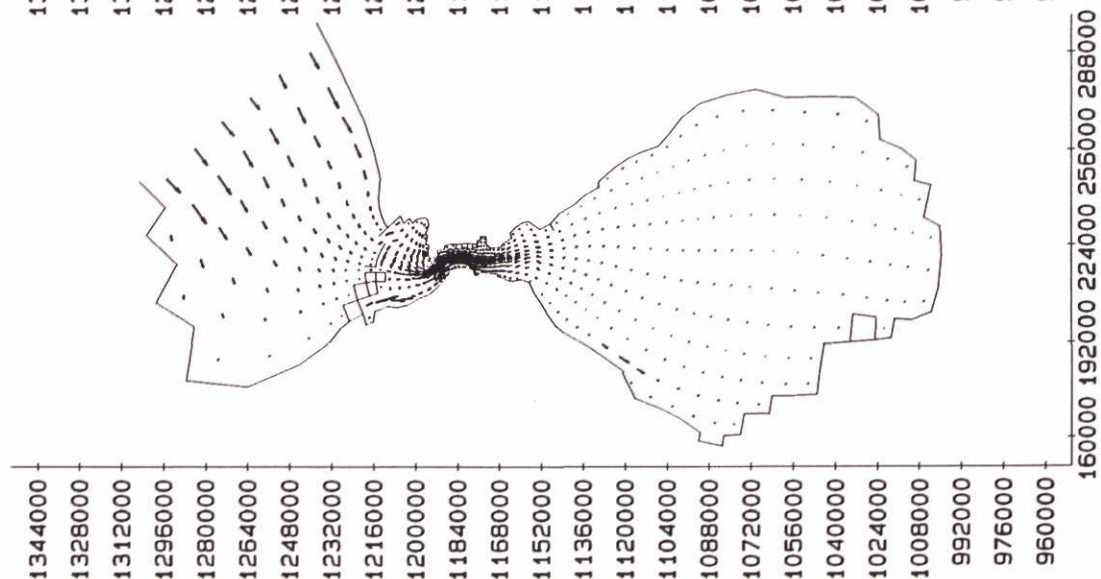
trim-s2q.dot s2q 930621 082145



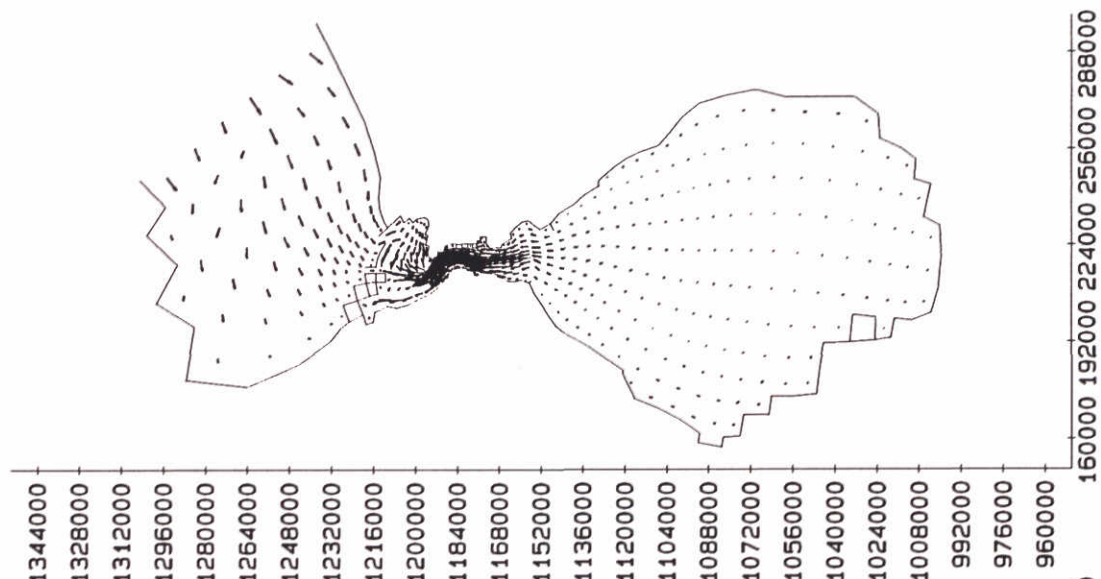
Vectorplots voor Meer van Maracaibo
voor standaard TRISULA
op t=1440 min.

1993-09-30
12:26:11

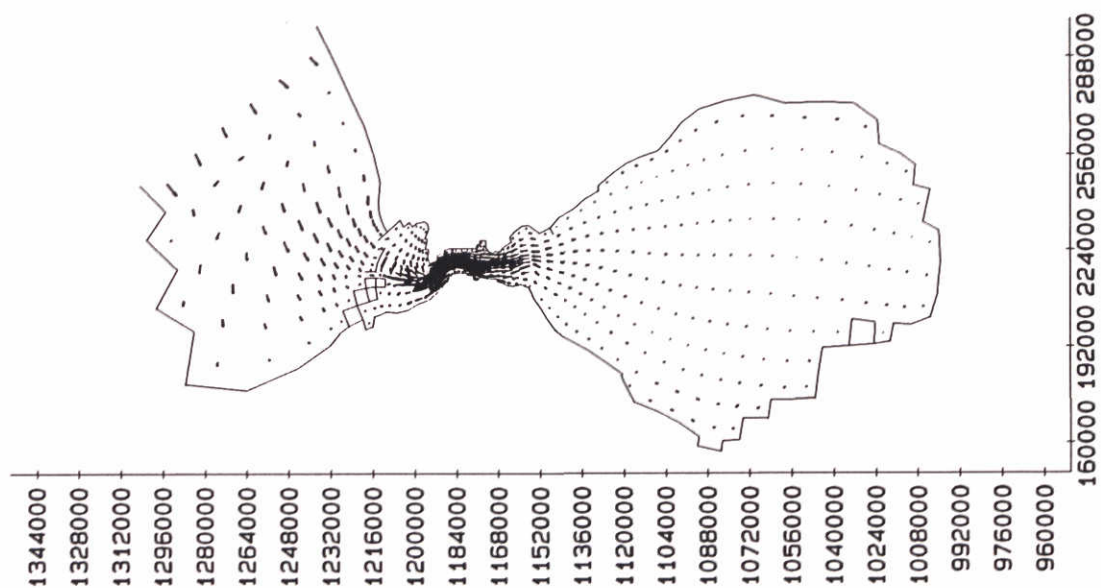
trim-ver.dat ver 930621 084848



trim-ver.dat ver 930621 084848

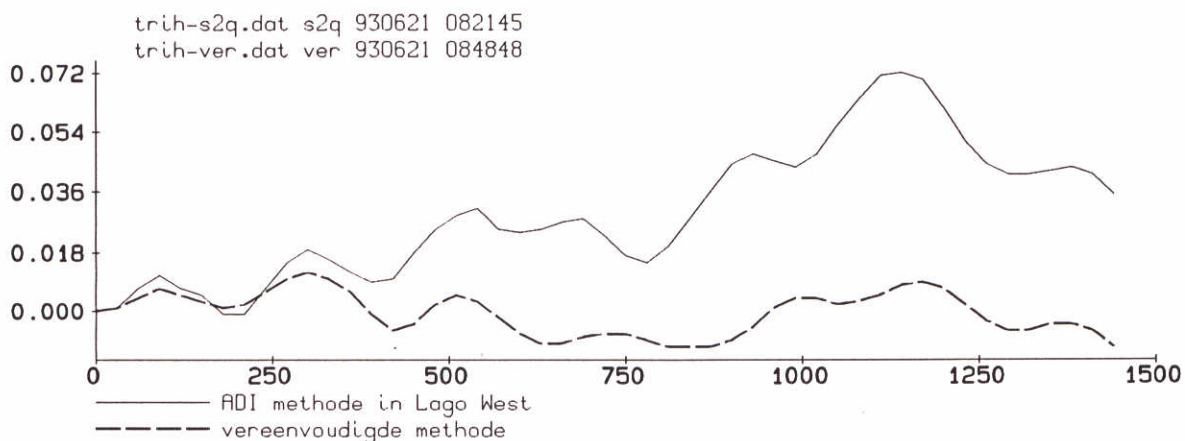
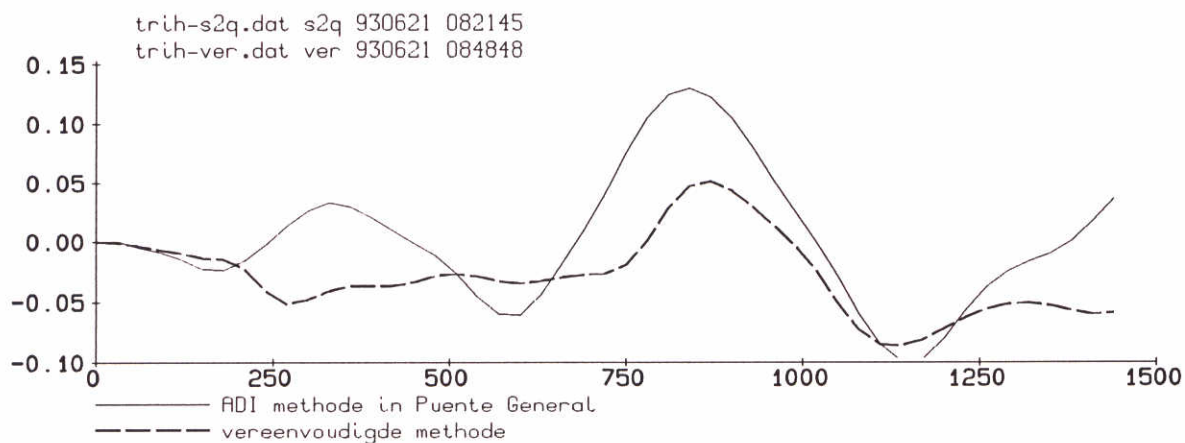
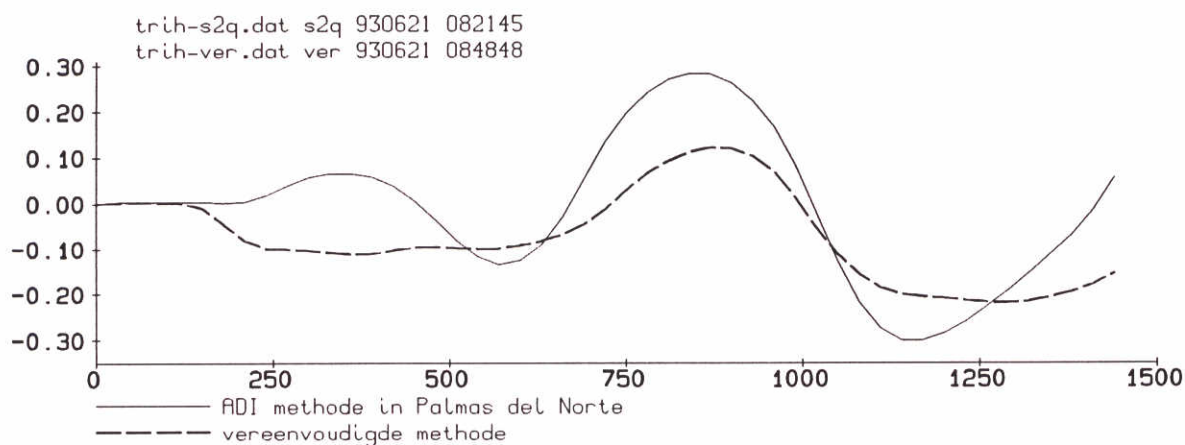
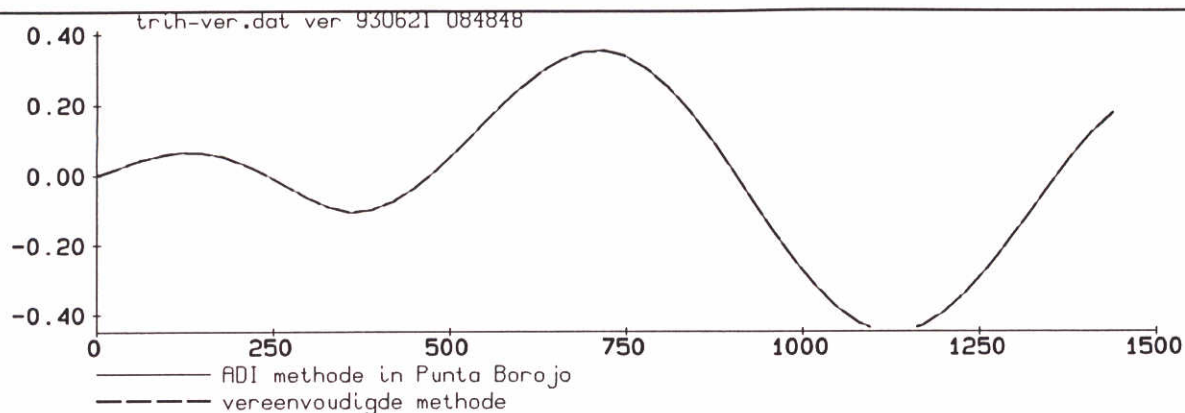


trim-ver.dat ver 930621 084848



Vectorplots voor Meer van Maracaibo
voor vereenvoudigde versie
op $t=1440$ min.

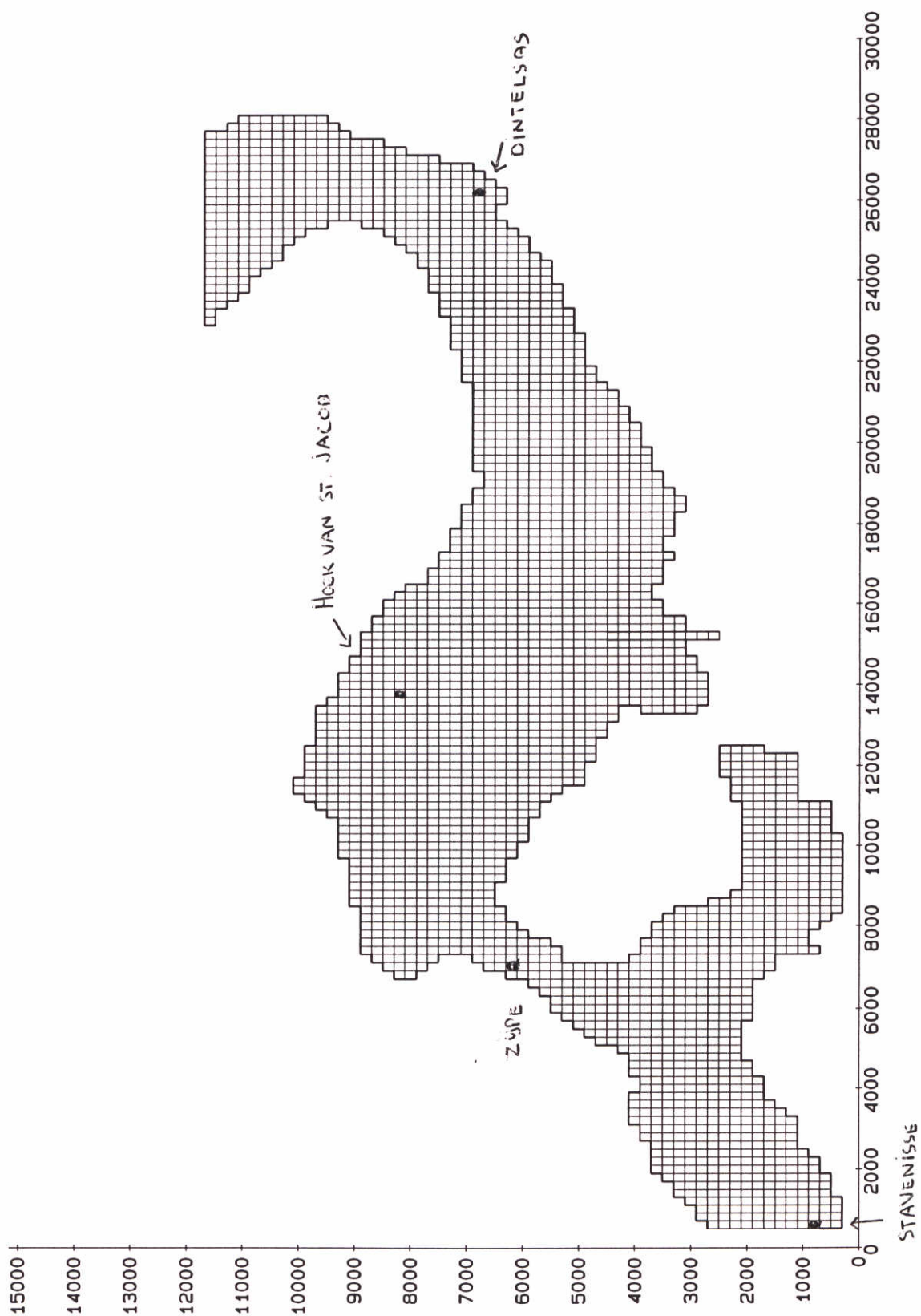
1993-09-30
12:25:43



Meer van Maracaibo
Waterstanden

1993-09-30
12:25:26

trim-odi.dat odi 930827 111226

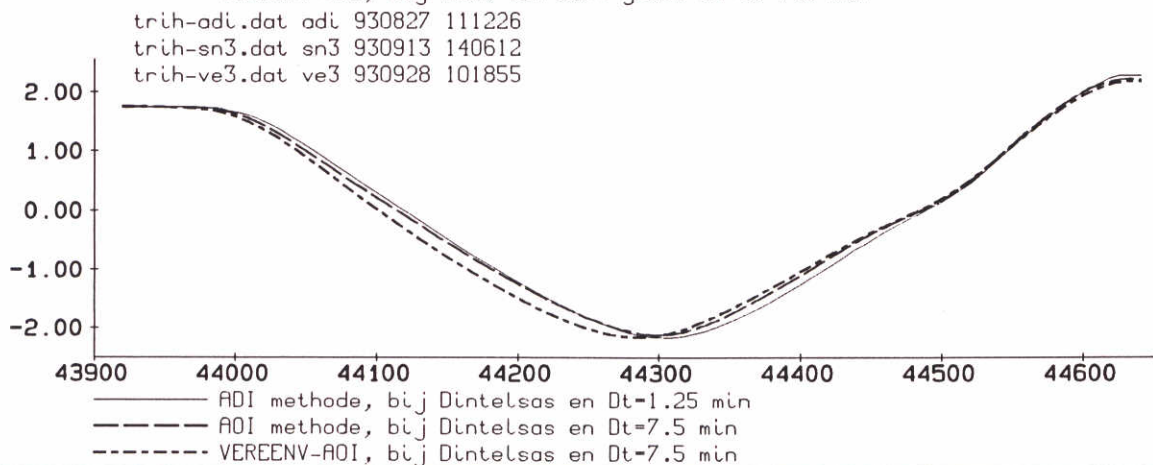
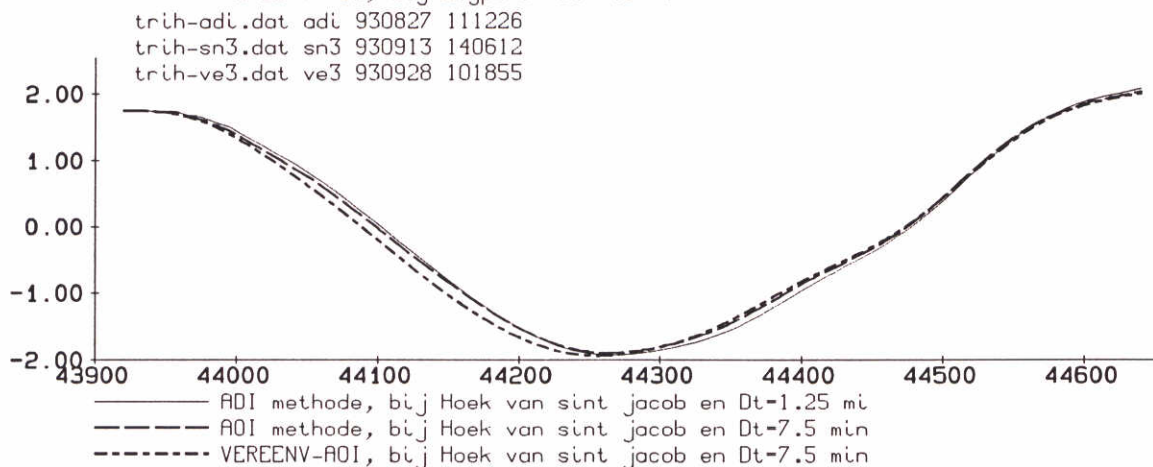
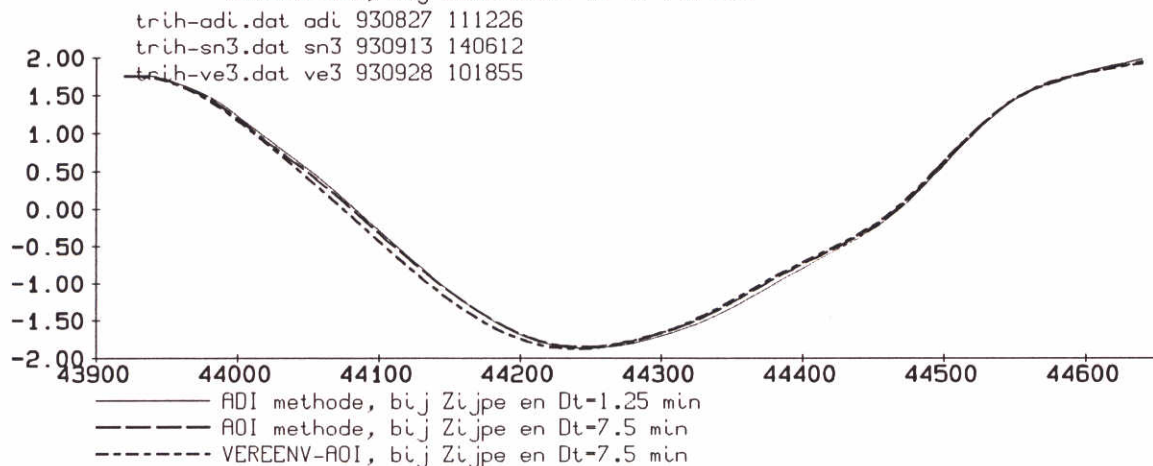
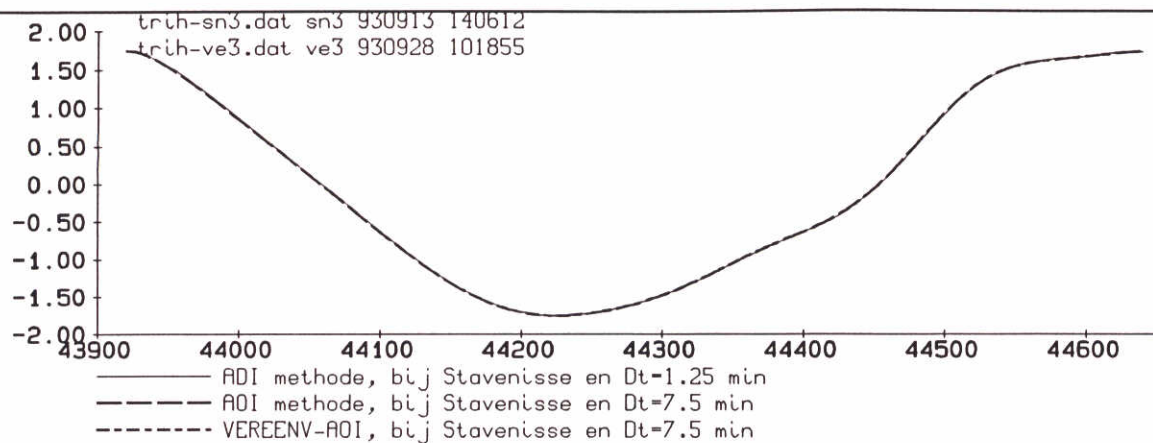


Geometrie voor Keeten Volkerak

1993-09-30
15:01:08

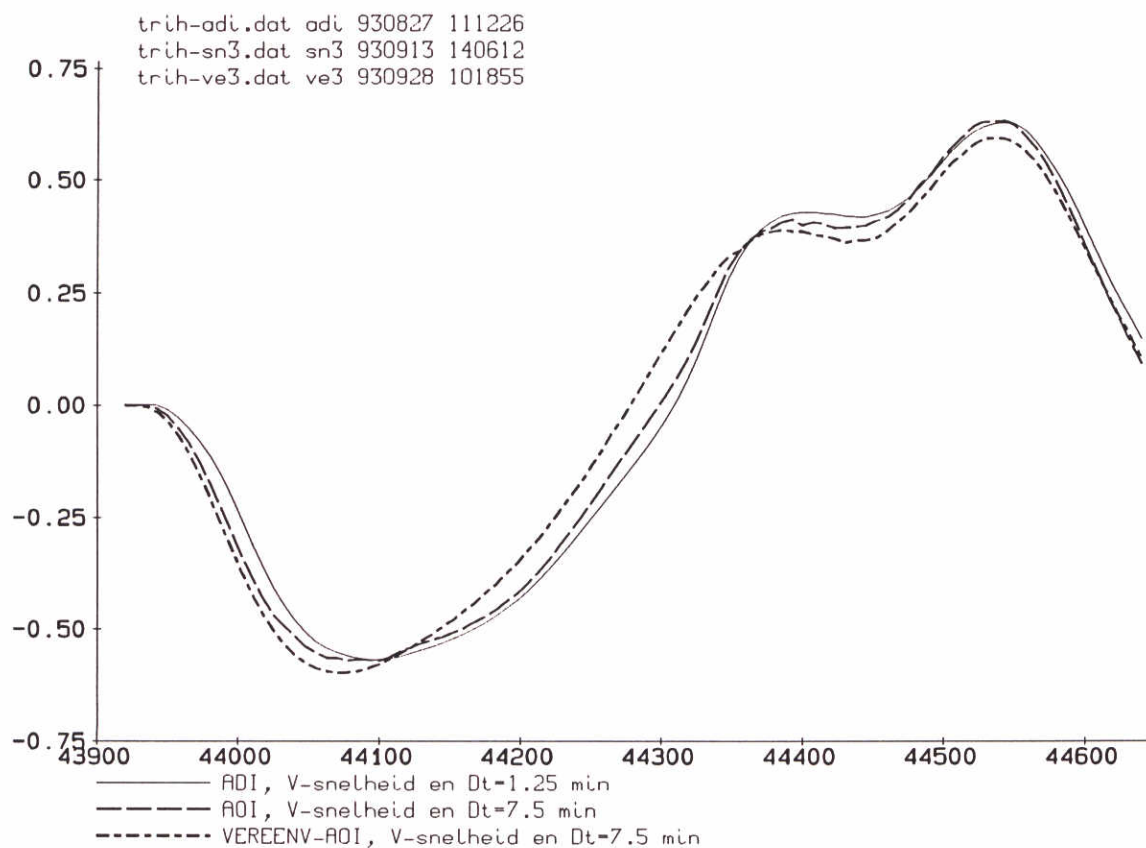
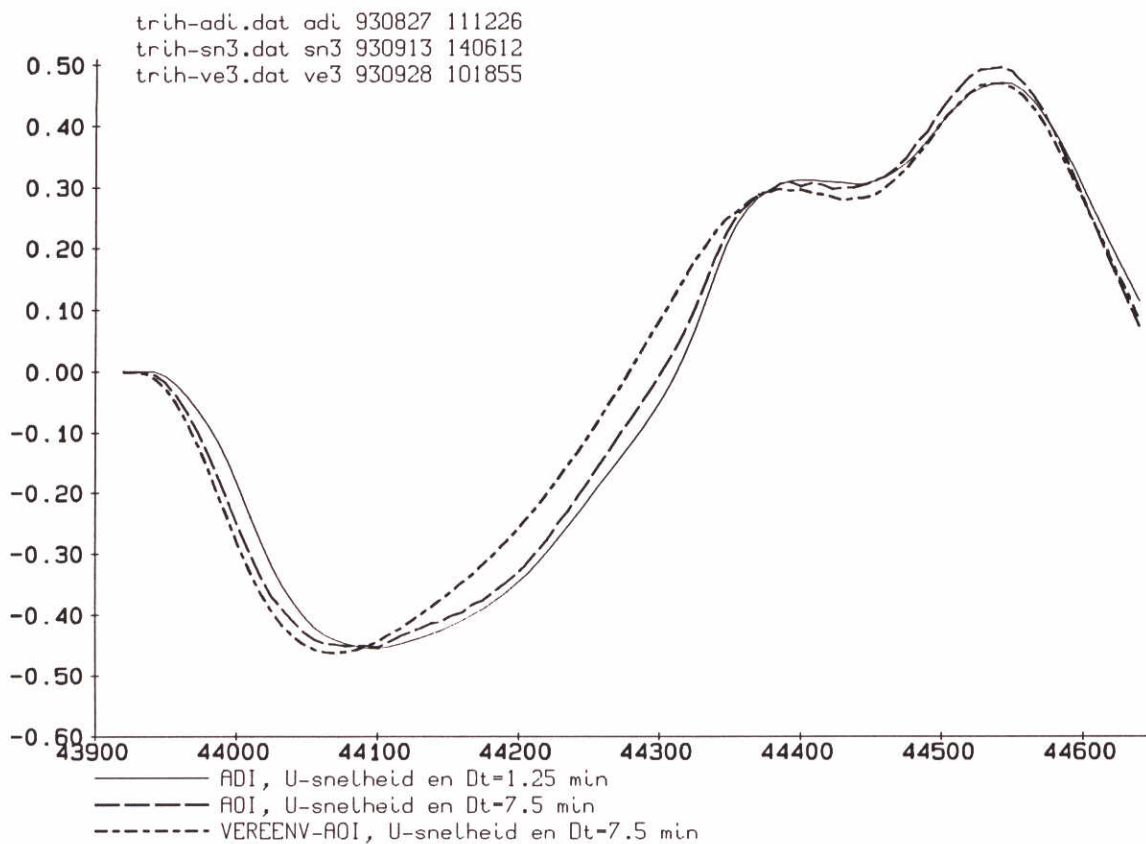
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig18



Waterstanden voor Keeten Volkerak
3D model

1993-09-30
15:00:53

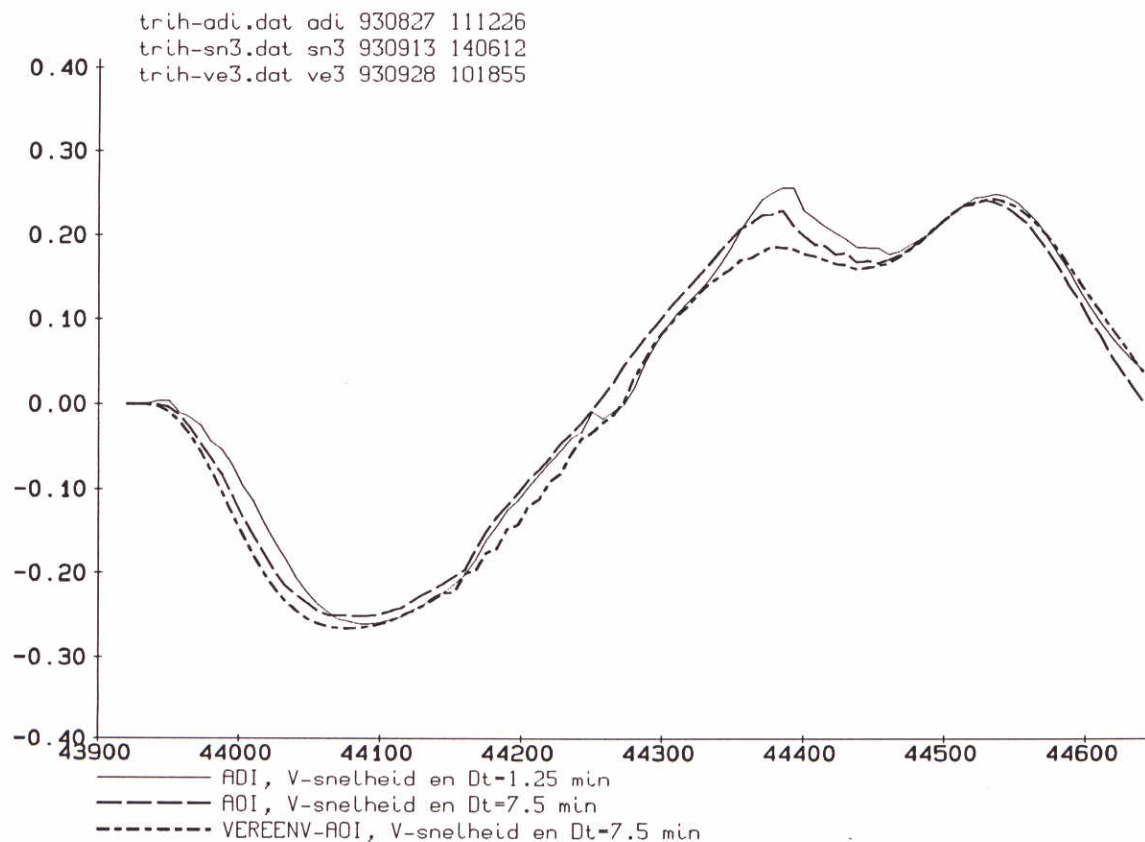
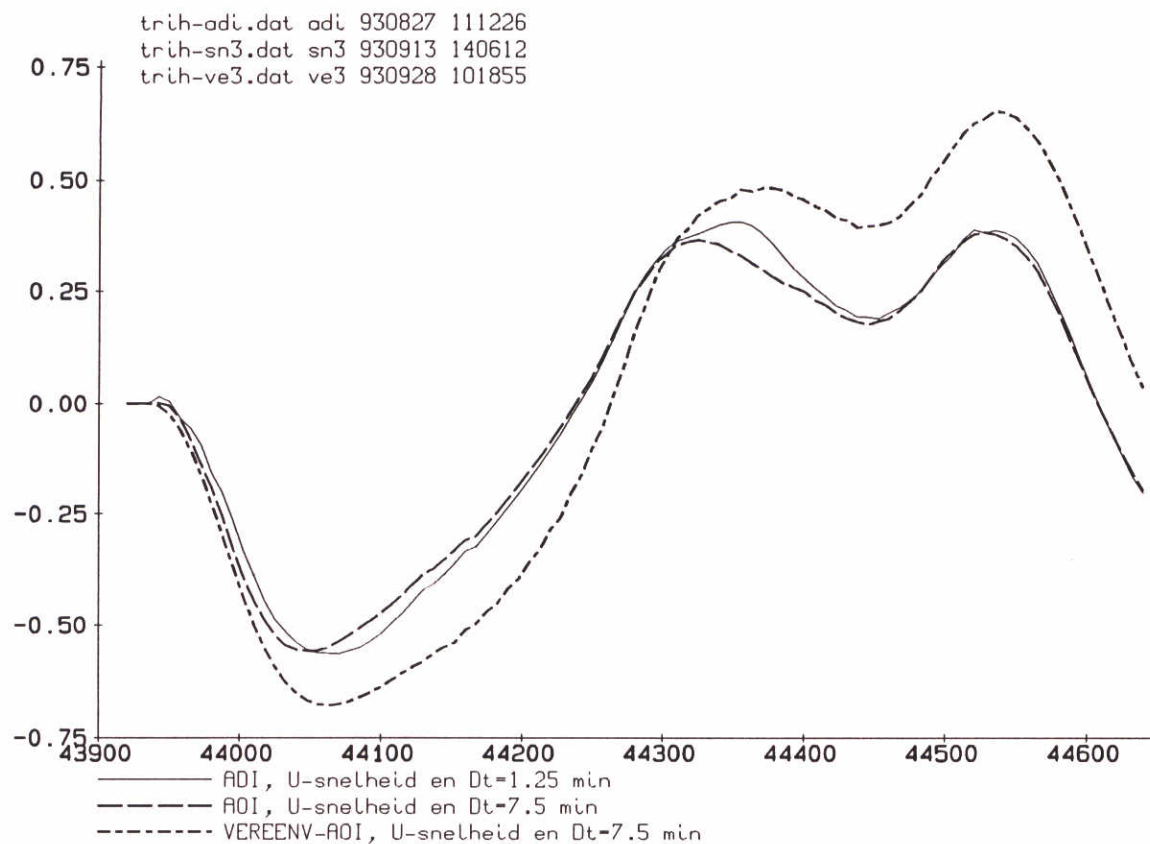


snelheden voor Keeten Volkerak bij Zijpe
3D model

1993-09-30
15:00:39

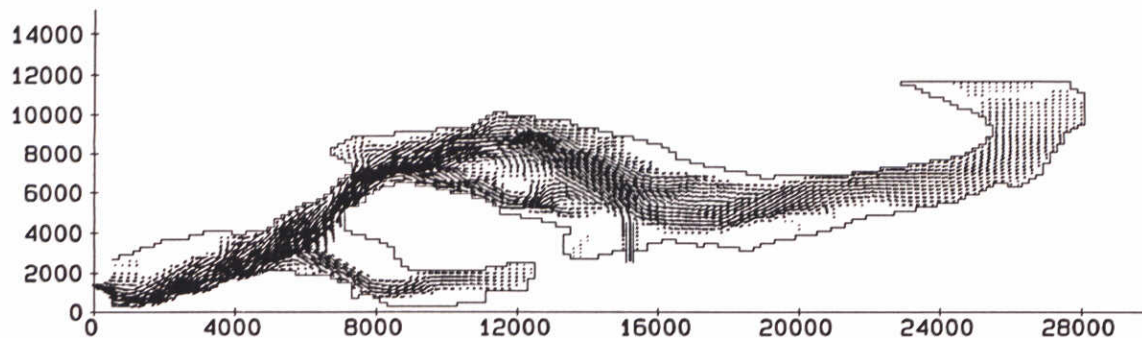
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig20



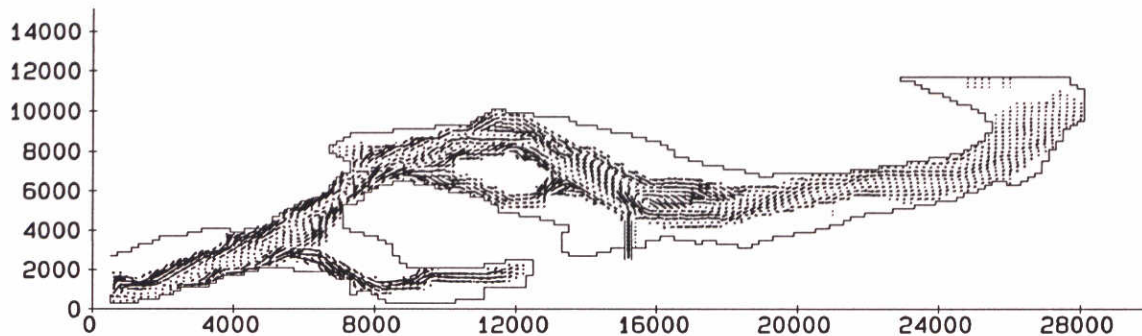
snelheden voor Keeten Volkerak bij Oostkop
3D model

1993-09-30
15:00:10



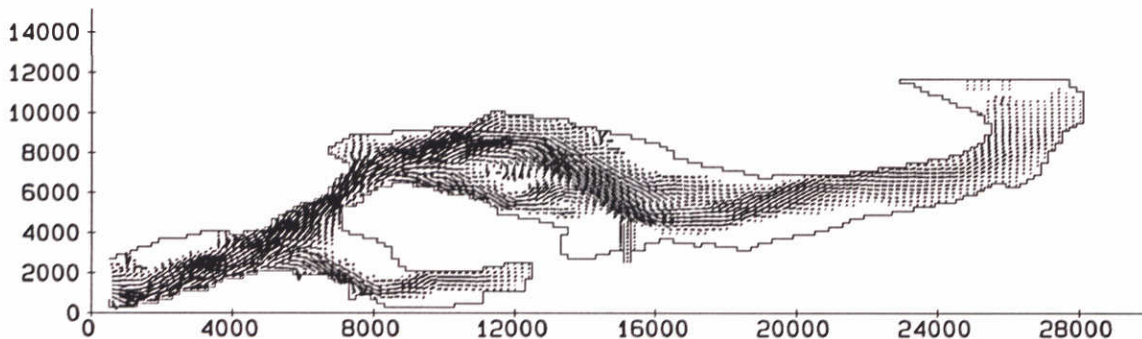
5.0 m/s →
trim-ve3.dat ve3 930928 101855

op t=44100 min.



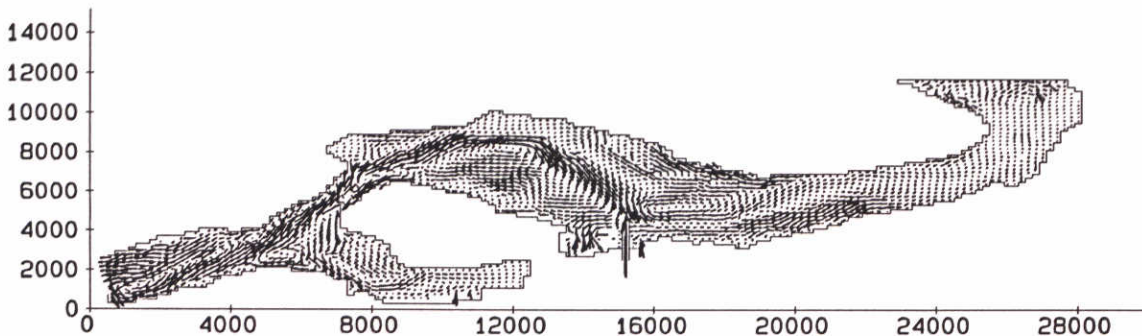
2.0 m/s →
trim-ve3.dat ve3 930928 101855

op t=44280 min.



4.0 m/s →
trim-ve3.dat ve3 930928 101855

op t=44460 min.



2.0 m/s →

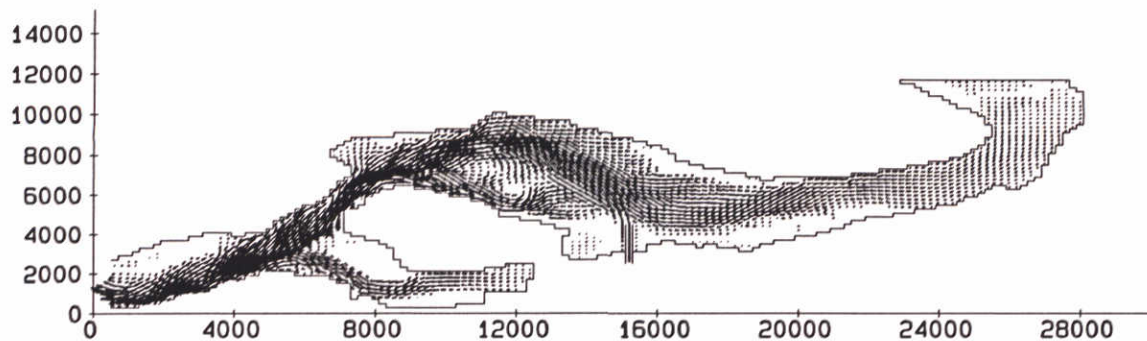
op t=44640 min.

Vectorplots voor Keeten Volkerak
vereenvoudigde AOI methode
3D model Dt=7.5 min

1993-09-30
15:09:50

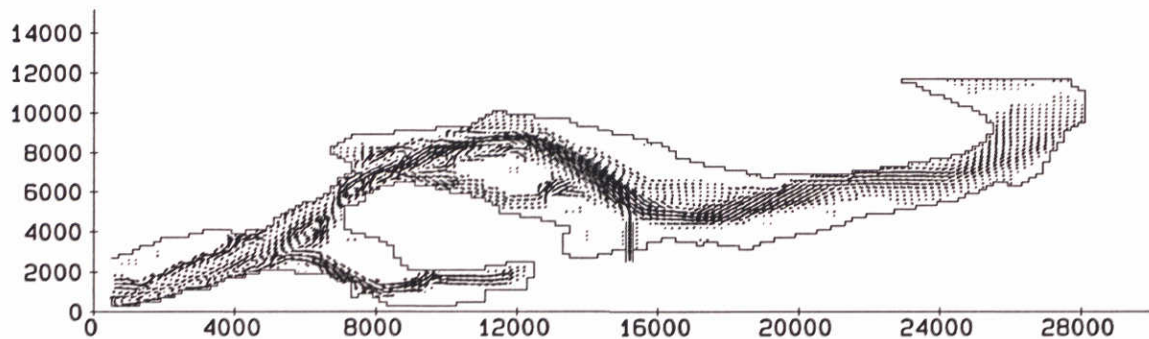
WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig22



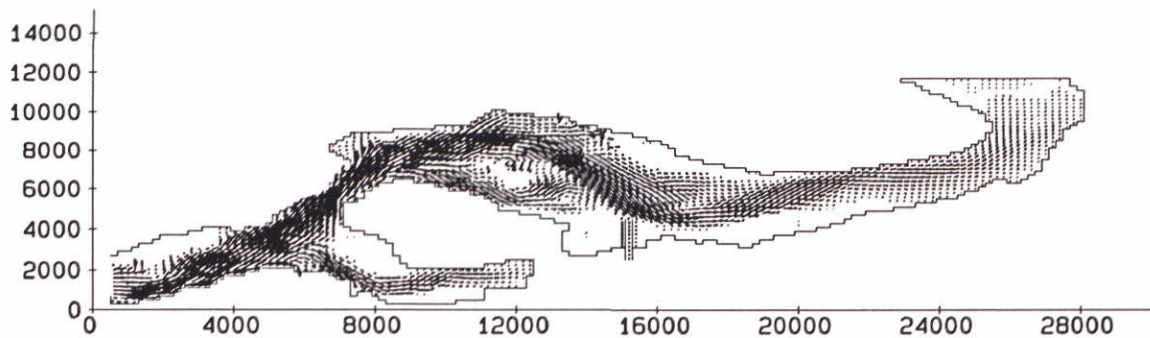
5.0 m/s →
trim-sn3.dat sn3 930913 140612

AOI methode op t=44100 min.



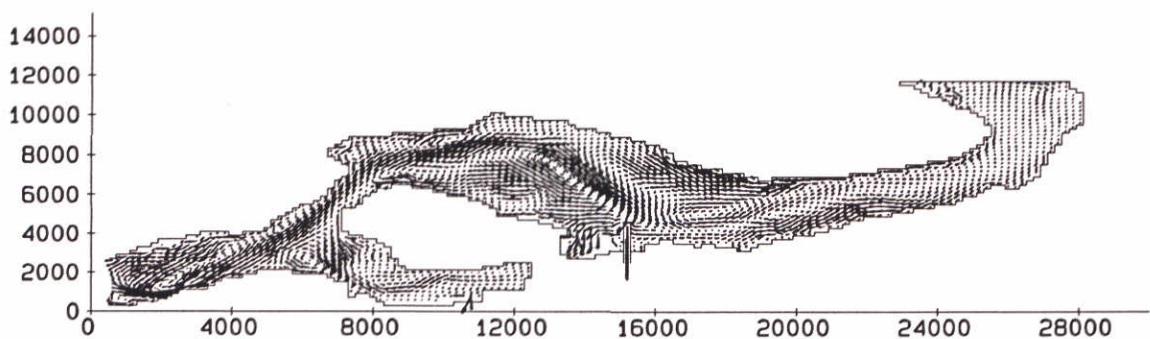
2.0 m/s →
trim-sn3.dat sn3 930913 140612

AOI methode op t=44280 min.



4.0 m/s →
trim-sn3.dat sn3 930913 140612

AOI methode op t=44460 min.



2.0 m/s →

AOI methode op t=44640 min.

Vectorplots voor Keeten Volkerak
AOI methode
3D model Dt=7.5 min

1993-09-30
15:11:16

WATERLOOPKUNDIG LABORATORIUM

fig23



hoofdkantoor
Rotterdamseweg 185
postbus 177
2600 MH Delft
telefoon (015) 56 93 53
telefax (015) 61 96 74
telex 38176 hydel-nl

locatie 'De Voorst'
Voorsterweg 28, Marknesse
postbus 152
8300 AD Emmeloord
telefoon (05274) 29 22
telefax (05274) 35 73
telex 42290 hylvo-nl

