Simulatie van oceaancirculatie op parallelle machines

Samenwerkingsverband:	NWO MPR-programma
Deelproject:	Parallelle numerieke modellen voor oceaancirculatie
Projectleider(s):	Prof.dr. H.A. van der Vorst, Prof.dr.ir. C. B. Vreugdenhil
Projectmedewerker(s):	Dr.ir. M.B. van Gijzen
Instelling:	Universiteit Utrecht

Waarom oceaanmodellering?
De interesse voor de stromingen in onze oceanen vloeit voort uit hun invloed op lange termijn weerseffecten. De globale oceaancirculatie is de belangrijkste manier van energietransport in het klimaatsysteem en veranderingen in de oceaancirculatie kunnen grote en moeilijk voorspelbare gevolgen hebben voor het klimaat op aarde. De dynamica van de oceanen wordt gedomineerd door turbulentie op schalen van 10 tot 50 kilometer en de huidige trend in computermodelering is om deze turbulentie te vangen met rekenroosters waarvan de rekenpunten 10 kilometer of minder uiteenliggen. Omdat men ook nog eens zo'n 20 tot 30 roosterpunten in de diepte mee wil nemen, komt men zo tot rekenroosters met miljoenen rekenpunten waarop dan bovendien nog meerdere onbekenden per roosterpunt meegenomen moeten worden (de snelheden van de oceaanstroming in elk der drie coördinaatrichtingen, de druk, de temperatuur en bijv. ook het zoutgehalte).
De stromingsdynamica van oceanen kan worden gekarakteriseerd als een 3-dimensionaal verschijnsel, waarbij de grootste dynamiek zich afspeelt in betrekkelijk smalle zones rond continenten en eilanden. Rotatie van de aarde, aandrijving door de wind, verdamping, warmteconvectie en neerslag zijn hierop van sterke invloed. Het warmtetransport en het zoutgehalte blijken essentiële factoren te zijn in het aandrijfmechanisme van oceaanstromingen. De modellering van dit alles vraagt een tamelijk nauwkeurige oplossing van de Navier-Stokes stromingsvergelijkingen, die daartoe benaderd worden op de gekozen roosters.

Noodzaak voor parallel rekenen
Het moge duidelijk zijn dat dit pakket van modelleringseisen om grootschalige rekenfaciliteiten vraagt, en in feite kan accurate modellering alleen maar via parallelle weg verkregen worden. Er zijn, uiteraard, verschillende computercodes beschikbaar; echter deze hebben allen gemeen dat de gewenste graad van modelleringsnauwkeurigheid niet bereikt kan worden, en bovendien bleken ze bij een eerste onderzoek slechts matig parallelliseerbaar te zijn. Daarom werd na zorgvuldig vooronderzoek besloten om met een geheel nieuwe code te beginnen, die van meet af aan zo opgezet zou moeten worden dat zij redelijk eenvoudig aan moderne parallelle verwerkingsmogelijkheden kan worden aangepast. De laatste eis is zeker geen sinecure omdat parallelle machines van verschillende fabrikanten doorgaans ook om verschillende programmeeraanpakken vragen.
Het bij het begin beginnen had als bijkomende voordeel dat diverse problemen, die zich bij bestaande codes hadden voorgedaan, heroverwogen konden worden en met moderne inzichten verwerkt konden worden.

Conventionele oceaanmodelleringscodes zijn gebaseerd op rekenroosters die het patroon van meridianen en breedtecirkels volgen. Dat leidt, bij het benaderen van de functie-afgeleiden die in de Navier-Stokes vergelijkingen voorkomen, tot problemen bij de polen waar alle meridianen immers samenkomen. Door de aardbol, voor zover het de oceanen betreft, te overdekken met min of meer gelijke driehoekjes en de oplossing van de Navier-Stokes vergelijkingen te benaderen met lineaire functies per driehoekje, de zogenaamde eindige elementen aanpak, kon een grote mate van modelleringsflexibiliteit verkregen worden. In feite kan met de huidige aanpak de lokale grootte van de driehoekjes aangepast worden aan de dynamiek van de oplossing of aan de lokale geometrie.

In de eerste fase van het project is gewerkt aan een rekenmodel waarbij de snelheden over de diepte gemiddeld worden. Dat is niet zo gek omdat de voornaamste stromingsverschijnselen zich toch in horizontale richtingen afspelen, en de tijdschalen in horizontale richting veel kleiner zijn dan in de verticale richting. Nu, na afronding van de eerste fase, gebleken is dat de code bevredigend werkt, is een begin gemaakt met het uitbreiden van het rekenmodel naar een met variabele diepten werkend 3-dimensionaal model. Met dit model worden de afwijkingen ten opzichte van de over de diepte gemiddelde stroming uitgerekend. Dit plaatst ons niet zo zeer voor nieuwe wiskundige moeilijkheden, maar de rekencomplexiteit neemt er natuurlijk wel enorm door toe.

Wiskundige complicaties

De globale oplossing van de stromingsvergelijkingen voor de oceanen wordt in feite verkregen door de lokale oplossingen per driehoekje (die lokaal aan de Navier-Stokes vergelijkingen moeten voldoen) netjes aan elkaar te knopen, waarbij bijvoorbeeld continuiteit van de oplossing over gemeenschappelijke zijden van aangrenzende driehoekjes geeist wordt. Bovendien gelden er nog randvoorwaarden langs de grenzen tussen oceaan en land (de continenten en de eilanden). Er is natuurlijk geen stroming loodrecht op de kust. Deze voorwaarde kan wiskundig vertaald worden naar de eigenschap dat de stroomfunctie (waarvan de afgeleiden de stroomsnelheden voorstellen) constant is langs een eiland of continent. Deze constanten zijn niet expliciet bekend, ze hangen bijvoorbeeld af van het windveld, en verschillen per continent of eiland. De constanten kunnen bepaald worden door gebruik te maken van het feit dat de waterhoogte altijd een eenduidige waarde heeft. Dit betekent dat, als je alle hoogtevariaties van het water rond een eiland (of rond een willekeurig ander gesloten pad door de zee) optelt, je op nul uit moet komen. Deze laatste conditie legt een behoorlijke complicatie op aan de numerieke oplosmethode. De omvang van dit probleem wordt in bestaande codes beperkt door slechts een paar eilanden of continenten in het rekenmodel mee te nemen. Het hoeft geen betoog dat dit een ernstige concessie is aan de nauwkeurigheid. Wij hebben, met hulp van de Utrechtse analytici Duistermaat en Kolk, het probleem wiskundig geherformuleerd zodat in onze code wel een willekeurig aantal eilanden of continenten kan worden meegenomen. Onze resultaten (zie figuur 1) zijn bemoedigend. Fysich ingewikkelde verschijnselen, zoals terugstroming rond Kaap de Goede Hoop, worden bijvoorbeeld goed gerepresenteerd.

Eerste parallelle resultaten

Massaal parallellisme wordt verkregen door de aarde op te delen in evenveel gebieden als we processoren ter beschikking hebben; zie figuur 2, waar dit voor vier gebieden is weergegeven. Iedere processor lost het oceaanstromingsprobleem voor het eigen gebied op, maar omdat alle deelproblemen van elkaar afhankelijk zijn moet er informatie worden uitgewisseld tussen

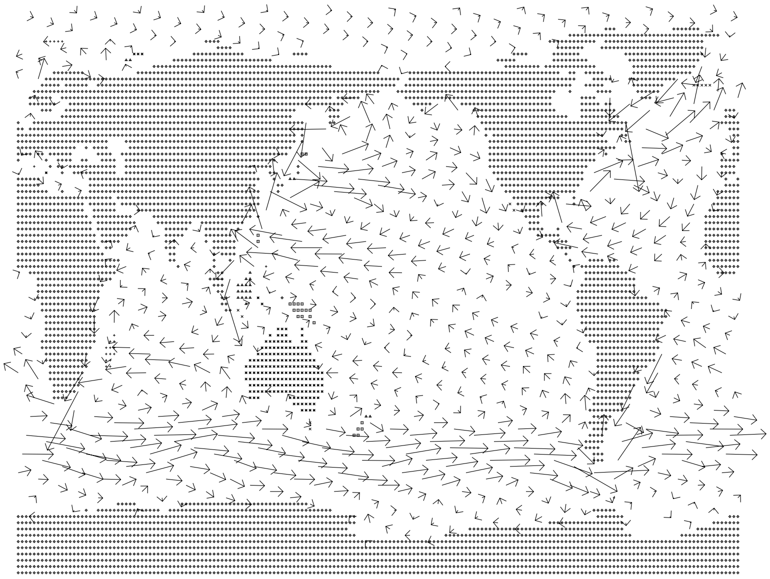

Figure 1: Snelheden van de stroming

de processoren. De informatieuitwisseling wordt gedaan door met speciale opdrachten aan te geven wanneer er gecommuniceerd moet worden en welke informatie naar welke processor moet. We hebben ons programma geschikt gemaakt voor een groot scala van massaal parallelle computers, zodat geen specifieke aanpassingen voor een bepaald type computer gedaan hoeven te worden. Er zijn testen uitgevoerd op de IBM SP-2, de Cray T3D en op een cluster van SUN werkstations. Deze drie werkomgevingen geven een redelijk representatief beeld van moderne parallelle rekenfaciliteiten.

Onze, voor drie-dimensionale modellen meest relevante, experimenten zijn uitgevoerd met een onderdeel van de code: het rekentijd verslindende rekenhart. Dit rekenhart lost de grote stelsels vergelijkingen op die ontstaan door het aaneenkoppelen van de elementjes in de gekozen eindige elementen formulering voor de stromingsvergelijkingen. Omdat in feite alles (indirect) met alles samenhangt, vergt het parallelliseren hiervan de meeste aandacht. Voor het oplossen van deze stelsels is op basis van gedegen vooronderzoek gekozen voor een iteratieve oplosmethode. De specifieke methoden, GMRES en Bi-CGSTAB, de laatste in Utrecht ontwikkeld, werden nog weer versneld door gebruik te maken van bekende eigenschappen van het stelsel.
We geven een paar rekentijden voor een vereenvoudigd probleem in drie dimensies, met in totaal 26000 onbekenden, voor de CRAY T3D.

Uit tabel 1 blijkt duidelijk dat iedere verviervoudiging van het aantal processoren tot een overeenkomstige reductie in rekentijd leidt; een zeer bevredigend resultaat.

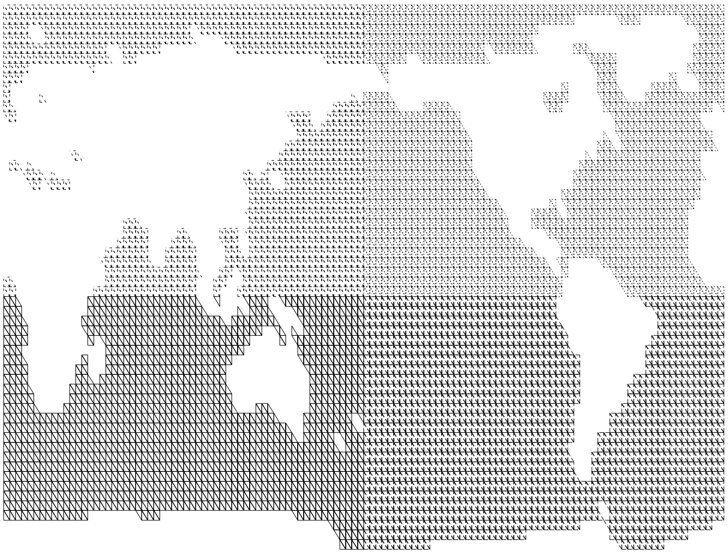

Figure 2: Verdeling van de aarde in vier gebieden

Table 1: Rekentijden voor oplosmethode op de CRAY T3D

aantal processoren	CPU-tijd (sec.)
1	221
4	55.2
16	13.9
64	3.5

Hoe nu verder?
Op basis van de verkregen resultaten en inzichten wordt nu in het NWO-MPR project door een andere groep gewerkt aan de verdere ontwikkeling van de code. Met name wordt de code geschikt gemaakt voor realistische 3-dimensionale modellering. Het gekozen roostermodel is zodanig dat het bestaande 2-dimensionale gedeelte van de code gehandhaafd kan blijven voor het oplossen per laag in de diepte. Naar verwachting zijn de belangrijkste numeriek-wiskundige problemen ten aanzien van het rekenmodel en de parallellisatie in het 2-dimensionale gedeelte bloot gelegd en opgelost. Aan de fysisch-oceanografische kant wordt verder gewerkt om een realistische topografie van de oceaanbodem aan te brengen. In iedere fase van dat proces zullen de uitkomsten het rekenmodel vergeleken worden met in de literatuur beschreven resultaten en waarnemingen. Het uiteindelijke doel, om te komen tot een realistisch 3-dimensionaal oceaan-klimaat-model dat geschikt is voor rekenvoorspellingen over perioden van vele jaren, is met de afronding van het SWON-deel een flinke stap dichterbij gekomen.