

University of Groningen

Solving large linear systems in an implicit thermohaline ocean model

de Niet, Arie Christiaan

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2007

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

de Niet, A. C. (2007). *Solving large linear systems in an implicit thermohaline ocean model*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

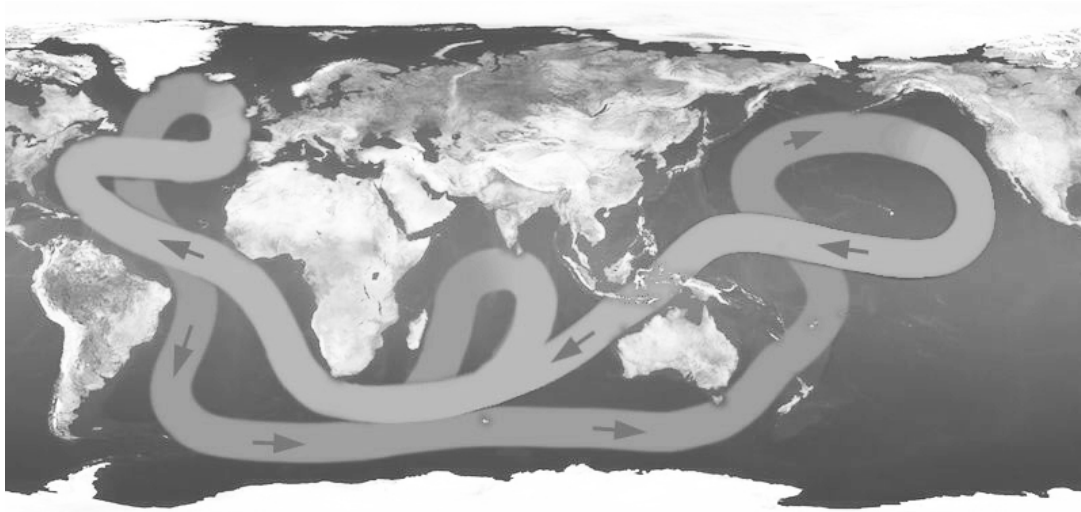
Oceaanstroming en klimaatverandering

In februari 2007 bracht het Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) een rapport [59] uit met daarin de meest recente wetenschappelijke gegevens rond het broeikaseffect. De boodschap was duidelijk: de opwarming van de aarde staat buiten kijf en het is zeer waarschijnlijk dat de mens er een groot aandeel in heeft. De stijging van de gemiddelde temperatuur heeft tot gevolg dat de ijskappen smelten. Wetenschappers voorspellen dat de Noordpool binnen enkele decennia in de zomer volledig ijsvrij zal zijn. De impact van het verdwijnen van het drijvende ijs op de Noordpool is echter beperkt. Veel dramatischer is het als het landijs op Groenland gaat smelten. De enorme hoeveelheid zoet water die daarbij vrijkomt, kan zeer grote gevolgen hebben voor het klimaat op aarde.

Een voorbeeld is het milde klimaat in Noordwest-Europa. Dit wordt veroorzaakt door de Golfstroom die warm water vanuit de Golf van Mexico via de Noord-Atlantische oceaan naar Europa transporteert. Op weg naar het noorden koelt het water af, zinkt en vervolgt haar weg over de bodem in zuidelijke richting. Onder wetenschappers is een debat gaande over de stabiliteit van de Golfstroom. Kan de instroom van een grote hoeveelheid zoet water door smeltend ijs op Groenland de Golfstroom destabiliseren en tot stilstand brengen? Dat zou grote invloed hebben op het klimaat in Europa.

De Golfstroom is onderdeel van de grotere globale oceaanstroming die ook wel de "conveyor belt" (transportband) wordt genoemd, zie Figuur 10.1. Het kenmerkende van de stroming is dat warm zout water in het noorden van de Atlantische oceaan afkoelt, zinkt, over de bodem naar de Indische en Grote of Stille oceaan stroomt, daar weer aan de oppervlakte komt, weer terug stroomt naar de Atlantische oceaan en onderweg als gevolg van de zon warmer en zouter wordt. Factoren die van invloed zijn op de stroming zijn: (i) de wind aan het oppervlak, (ii) verschillen in temperatuur als gevolg van de zon en (iii) verschillen in zout gehalte als gevolg van verdamping, neerslag, instroom van rivieren en smeltwater van de ijskappen. De stroming wordt verder bepaald door de draaiing van de aarde, die een sterke Coriolis kracht geeft, en door de aanwezigheid van continenten en een behoorlijk ruige bodemtopografie.

Het klimaat op aarde wordt voor een belangrijk deel bepaald door de globale oceaanstroming. Het is dan ook van groot belang om te weten hoe de oceaan reageert op verstoring door bijvoorbeeld een grote hoeveelheid zoet water. De manier om daar achter te komen is het ontwikkelen van een computermodel dat de globale oceaanstroming als weergegeven in Figuur 10.1 kan berekenen. Daarvoor is het allereerst nodig alle natuurkundige processen die



Figuur 10.1: De globale oceaan circulatie (uit [29]).

een rol spelen, goed te vertalen naar een wiskundig model.

Daarnaast willen we gebruik maken van satellietgegevens over de waterhoogte en de geoiden om de stroming aan het oppervlak te bepalen. De geoid is een oppervlak rond de aarde waarvoor de zwaartekracht in elk punt loodrecht op dit oppervlak staat en dientengevolge is er in elk punt op dit oppervlak geen kracht evenwijdig aan het oppervlak. Deze geoid is geen perfecte bol, omdat de aarde dat niet is. Bovendien beïnvloeden bergen en troggen lokaal de zwaartekracht. De GOCE missie die eind 2007 gelanceerd zal worden, gaat de geoiden bepalen met enkele centimeters nauwkeurigheid. Voor de waterhoogte zijn al nauwkeurige data beschikbaar.

Als er geen stroming zou zijn in de oceanen zou het wateroppervlak samenvallen met de geoid. De aanwezigheid van stroming zorgt ervoor dat wateroppervlak en geoiden van elkaar afwijken. In het geval van de Golfstroom is die afwijking ongeveer een meter. Door het verschil tussen geoiden en waterhoogte over de hele aarde te bepalen krijgen we een indruk van de stroming aan het oppervlak. Dat stromingsprofiel gebruiken we vervolgens om het model te verbeteren.

Het berekenen van de globale oceaanstroming

Aan het Institute for Marine and Atmospheric research Utrecht (IMAU) is de afgelopen jaren het computermodel THCM ontwikkeld. Dit model berekent de volledige driedimensionale oceaanstroming, dat wil zeggen de stroomsnelheden in drie richtingen, de druk, de temperatuur en het zoutgehalte. Deze grootheden hangen af van de plaats en de tijd en zijn onderhevig aan natuurkundige wetten voor behoud van impuls (in drie richtingen), massa, warmte en zout. De wiskundige vergelijkingen die het resultaat zijn van deze behoudswetten staan uitgebreid beschreven in Hoofdstuk 2. Deze *niet-lineaire partiële differentiaalvergelijkingen* zijn te complex

om analytisch op te lossen, met andere woorden, het is onmogelijk om een algemene functie voor een grootheid als de temperatuur te bepalen, waarin we een willekeurig punt in tijd en ruimte kunnen invullen om daar de exacte temperatuur te krijgen. Noodgedwongen benaderen we de oplossing door een rooster over de oceaan te leggen. In elke cel van het rooster nemen we aan dat de grootheden constant zijn. De oorspronkelijke vergelijkingen kunnen worden vertaald naar benaderende vergelijkingen op het rooster, wat resulteert in een serie vergelijkingen die afhankelijkheden geven voor grootheden in cellen die bij elkaar in de buurt liggen. Door deze benadering is het aantal vergelijkingen niet langer zes, maar zes maal het aantal cellen in het rooster. Hoe fijner het rooster hoe meer detail we kunnen vangen in de oplossing en hoe nauwkeuriger het model is. De grootte van de cellen hangt dus direct samen met de nauwkeurigheid van de oplossing. Ook het model staat uitgebreid beschreven in Hoofdstuk 2.

Aan het begin van het project waarvan de resultaten in dit proefschrift staan beschreven, bestond het computer model THCM al. De mogelijkheden waren echter beperkt doordat een model-run erg veel rekentijd en computergeheugen vergde, met als gevolg dat we noodgedwongen een grove resolutie gebruikten. Om realistischer berekeningen te doen is een fijner rooster nodig. Het is noodzakelijk de rekentechnieken te verbeteren om een stap vooruit te kunnen doen in oceaan-klimaat modellering. De grote uitdaging voor dit proefschrift is het verbeteren van de rekenmethoden, zodat het mogelijk is op grote schaal te rekenen aan het oceaanmodel met voldoende nauwkeurigheid.

Het oplossen van een stelsel vergelijkingen

Het knelpunt in de berekeningen is het oplossen van de vergelijkingen. Voordat we uit kunnen leggen wat en hoe we dit probleem hebben aangepakt, is het nodig iets uit te leggen over het oplossen van stelsels vergelijkingen. Ik zal dat doen aan hand van een klein voorbeeld. Stel dat we (slechts) drie onbekenden hebben, die we de naam geven: x_1 , x_2 en x_3 . Voor deze drie onbekenden gelden de volgende drie vergelijkingen:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 4x_2 - x_3 &= 9, \\ -4x_1 + 2x_2 - 3x_3 &= -3, \\ -x_1 + 3x_2 + 4x_3 &= -3. \end{aligned} \tag{10.1}$$

Deze vergelijkingen zijn allemaal lineair, dat wil zeggen, de onbekenden komen alleen voor in combinatie met een constante factor. Kwadraten of andere ingewikkelde functies van x_1 , x_2 en x_3 spelen geen rol. We hebben drie onbekenden en drie vergelijkingen, die in dit geval een unieke oplossing geven voor x_1, x_2 en x_3 . Om dit stelsel op te lossen, schrijven we het in *matrix-vector* vorm

$$Ax = b, \tag{10.2}$$

waarbij A een matrix (een vierkant blok getallen) is, x de vector met onbekenden en b een vector met de waarden aan de rechterkant van het ongelijk teken. Voor ons voorbeeld betekent

het dat de matrix en de vectoren er als volgt uit zien:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 \\ -4 & 2 & -3 \\ -1 & 3 & 4 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 9 \\ -3 \\ -3 \end{bmatrix}.$$

We krijgen de oorspronkelijke vergelijking terug door de matrix-vector vermenigvuldiging uit te schrijven. Elke rij van A vermenigvuldigen we met de vector x door element voor element te vermenigvuldigen en het resultaat te sommeren.

De klassieke manier om een dergelijke vergelijking op te lossen is het ontbinden van de matrix A in een product van twee eenvoudiger matrices

$$A = LU, \tag{10.3}$$

waarbij L een onderdriehoeksmatrix is (alleen maar nullen boven de diagonaal), en U een bovendriehoeksmatrix (enkel nullen onder de diagonaal). Ons voorbeeld geeft de factoren

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -0.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{en} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 \\ 0 & 10 & -5 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}. \tag{10.4}$$

We kunnen nu x bepalen in twee stappen. We lossen eerst de vergelijking

$$Ly = b \tag{10.5}$$

op, gevolgd door de vergelijking

$$Ux = y. \tag{10.6}$$

Als we beide vergelijkingen combineren om de onbekende vector y weg te werken, zien we dat we op deze manier de juiste oplossing bepalen voor x . Immers $b = Ly = L(Ux) = L U x = Ax$.

Als we de matrix-vector vermenigvuldiging in vergelijking (10.5) uitschrijven krijgen we het stelsel

$$\begin{aligned} y_1 &= 9, \\ -2y_1 + y_2 &= -3, \\ -0.5y_1 + 0.5y_2 + y_3 &= -3. \end{aligned}$$

Door de onderdriehoeksvorm van de matrix L is dit stelsel eenvoudig op te lossen. De eerste vergelijking geeft onmiddellijk $y_1 = 9$. Gegeven y_1 kunnen we met de tweede vergelijking y_2 bepalen: $y_2 = (-3 + 2y_1) = (-3 + 18) = 15$. Tenslotte geeft de derde vergelijking $y_3 = (-3 + 0.5y_1 - 0.5y_2) = (-3 + 4.5 - 7.5) = -6$.

Nu de vector y bekend is, kunnen we x oplossen door vergelijking (10.6) uit te schrijven:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 4x_2 - x_3 &= 9, \\ 10x_2 - 5x_3 &= 15, \\ 6x_3 &= -6. \end{aligned}$$

Omdat de matrix U een bovendriehoeksvorm heeft, beginnen we op te lossen vanaf de laatste vergelijking, waaruit onmiddellijk volgt $x_3 = -1$. Dat gebruiken we in de tweede vergelijking om $x_2 = 1$ te berekenen. Tenslotte geeft de eerste vergelijking $x_1 = 2$. Dus onze oplossing is

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Door deze uitkomst in te vullen in vergelijking (10.1) valt eenvoudig te controleren dat dit inderdaad de oplossing is. Deze aanpak, waarbij een LU -ontbinding wordt gemaakt, die vervolgens wordt gebruikt om de oplossing in twee stappen te berekenen, wordt ook wel *direct* genoemd.

De stelsels in het oceaanmodel zijn vele malen groter dan dit eenvoudige voorbeeld. In het model lossen we vergelijkingen op van de vorm (10.2), maar dan met een matrix A die honderd-duizend of meer rijen en kolommen bevat. In onze toepassing is de matrix A bovendien erg *ijl*, wat wil zeggen dat de matrix voor het grootste deel uit nullen bestaat. Per rij zijn er hoogstens 10 elementen ongelijk aan nul. We kunnen van de ijle structuur gebruik maken, door alleen de niet-nullen te onthouden. Dat scheelt erg veel computer geheugen. Echter bij het bepalen van de LU -ontbinding zoals in (10.3), neemt het aantal niet-nullen in de factoren L en U snel toe. We kunnen dat enigszins voorkomen door de volgorde van de onbekenden in x aan te passen. Voor de matrix A betekent dat een symmetrische verwisseling van rijen en kolommen. Zelfs als we dat erg goed doen zal er voor de opslag van de factoren L en U aanzienlijk meer geheugen nodig zijn dan voor de opslag van A . Bovendien neemt het geheugengebruik harder toe naar mate het probleem groter wordt. Het aanlopen tegen de grenzen van het beschikbare geheugen is een typische beperking op de toepasbaarheid van directe methoden.

Als alternatief voor de directe aanpak kunnen we een *iteratieve methode* gebruiken. Daarbij berekenen we de oplossing niet rechtstreeks, maar we construeren een rij $\{x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\}$ van steeds betere benaderingen voor die oplossing. In het algemeen gebruiken iteratieve methoden veel minder geheugen. Het nadeel is echter dat er in veel gevallen erg veel iteraties nodig zijn voordat er een benadering wordt gevonden die dicht genoeg bij de oplossing ligt. We kunnen de prestaties van iteratieve methoden flink verbeteren door *preconditionering*. De essentie van preconditionering is dat we niet de vergelijking (10.2) oplossen maar een vergelijking

$$P\tilde{x} = b. \tag{10.7}$$

waarbij P een matrix is, die gekozen is zodat

- (i) P een goede benadering is voor A ,
- (ii) P eenvoudig te bouwen is,
- (iii) een vergelijking met P makkelijker op te lossen is dan een vergelijking met A .

Omdat we in (10.7) een andere vergelijking oplossen dan in (10.2), zijn de oplossingen x en \tilde{x} niet aan elkaar gelijk. Echter, als we een goede preconditioner kiezen, zal het verschil $x - \tilde{x}$ niet al te groot zijn en dus zal $b - A\tilde{x}$ dichtbij nul liggen. De correctie Δx die nodig is om \tilde{x} naar de exacte oplossing te brengen volgt uit $A\Delta x = b - A\tilde{x}$. In deze vergelijking vervangen we de eerste matrix A opnieuw door de preconditioner; dit geeft $P\Delta x = b - A\tilde{x}$. Met de oplossing voor Δx volgt nu een nieuwe betere benadering voor de exacte oplossing: $\hat{x} = \tilde{x} + \Delta x$. Als deze nieuwe benadering niet goed genoeg is herhalen we deze procedure. In het algemeen geldt: hoe beter de preconditioner hoe sneller de convergentie in een iteratieve methode.

Een voorbeeld van zo'n preconditioner is een niet-exacte LU ontbinding. In plaats van (10.3) berekenen we de ontbinding

$$A = \tilde{L}\tilde{U} + E, \quad (10.8)$$

waarbij \tilde{L} en \tilde{U} ijlere benaderingen zijn voor de exacte factoren L en U . Doordat de factoren niet exact zijn, maken we een fout die we in de matrix E terug vinden. Doordat \tilde{L} en \tilde{U} veel ijler zijn, is het allereerst eenvoudiger om ze te bouwen. Daarnaast is er minder geheugen nodig om de matrices op te slaan en het oplossen van een stelsel vergelijkingen met deze boven- en onderdriehoeksmatrix is ook nog eens een stuk goedkoper. Het nadeel van iteratieve methoden is dat het niet eenvoudig is om een goede preconditioner te vinden voor complexe problemen zoals ons oceaan model.

In Hoofdstuk 3 worden directe en iteratieve methoden voor het oplossen van een stelsel vergelijkingen uitgebreider beschreven.

Het oplossen van vergelijkingen uit het oceaanmodel

De focus van dit proefschrift ligt in het ontwikkelen van nieuwe preconditioners voor de matrices uit het oceaanmodel. In de oorspronkelijk versie van het model, werd voor het oplossen van stelsels vergelijkingen gebruik gemaakt van MRILU een inexacte LU ontbinding. Deze methode werkt erg goed op een hele reeks van matrices, maar helaas heeft MRILU moeite met de matrices uit het oceaanmodel. Er is te veel geheugen en tijd nodig om een preconditioner met voldoende kwaliteit te bouwen.

De oorzaak van de moeiten die solvers in het algemeen hebben met de oceaanmatrices ligt voor een belangrijk deel in het feit dat onze problemen een aantal grote nul-blokken op de diagonaal bevat. Voor de structuur zie de inleiding van Hoofdstuk 7. De lege diagonaal blokken worden veroorzaakt door de onderliggende natuurkundige vergelijkingen en ze geven problemen bij het construeren van de (inexacte) LU ontbindingen in vergelijking (10.3) en (10.8). Soortgelijke problemen komen voor bij een deelprobleem van de oceaan matrix: het *zadelpuntprobleem*, waarbij we een vergelijking oplossen met een matrix van de vorm

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B^T & 0 \end{bmatrix}, \quad (10.9)$$

hierin zijn A en B grote ijle matrices, B^T is de getransponeerde van B , dat is, de kolommen van B zijn de rijen van B^T . Zadelpuntproblemen komen veel voor als het resultaat van een stromingsvergelijking. Kennis van het oplossen van zadelpuntproblemen kan ons helpen bij het oplossen van vergelijkingen uit het oceaanmodel. Daarom staan zadelpuntproblemen in een groot deel van het proefschrift centraal.

Een combinatie van directe en iteratieve methoden

Het oorspronkelijke idee voor het ontwikkelen van een betere solver voor de oceaanmatrices was het integreren van directe en iteratieve methoden. Door de preconditioner MRILU aan te passen met gebruik van technieken uit directe methoden, zouden we de kwaliteit van de ontbinding kunnen verbeteren, waarbij minder geheugen en minder rekentijd nodig zouden zijn. In Hoofdstuk 5 hebben we de mogelijkheden van zo'n combinatie onderzocht. Voor de eenvoudiger Poisson vergelijking gaat dat prima, maar zodra we de stap maken naar het zadelpuntprobleem, worden de prestaties aanzienlijk slechter. De conclusie uit dat hoofdstuk is dat het onwaarschijnlijk is dat de incorporatie van dergelijk technieken in MRILU ons werkelijk veel verder zullen brengen.

Een directe methode voor het zadelpuntprobleem

In Hoofdstuk 4 ontwerpen we een nieuwe directe methode voor zadelpuntproblemen zoals in (10.9) met wat extra beperkingen op de structuur van deelmatrix B . Het algoritme heeft een aantal aantrekkelijke eigenschappen. Zo blijft bijvoorbeeld veel van de structuur van de oorspronkelijke matrix behouden tijdens het ontbinden van de matrix in factoren L en U . Een belangrijk resultaat uit dit hoofdstuk is een nieuw bewijs dat de ontbinding gegarandeerd numeriek stabiel is met een kleine groeifactor. Met andere woorden: het is gegarandeerd dat de ontbinding bestaat en dat de grootte van de elementen in L en U begrensd zijn. Dat betekent dat de oplossing x die we berekenen met behulp van de factoren, voldoende nauwkeurig is.

Numerieke experimenten laten zien dat onze aanpak ijlere factoren L en U oplevert dan bestaande methoden.

Pogingen om deze directe methode om te zetten in een preconditioner gecombineerd met een iteratieve methode zijn vooralsnog op niets uitgelopen. Kleine aanpassingen in de richting van een inexacte ontbinding hadden tot gevolg dat het aantal iteraties in de iteratieve methode snel opliep.

Preconditionering voor het zadelpuntprobleem

Voor zadelpuntproblemen valt het niet mee om inexacte en exacte ontbindingen te combineren. Dat wordt voor een deel veroorzaakt door het feit dat MRILU en veel andere solvers de matrix als een zwarte doos beschouwen. Er wordt geen rekening gehouden met de herkomst van de matrix. Alle onbekenden en vergelijkingen worden gelijk behandeld. Juist bij zadelpuntproblemen zijn er twee duidelijk verschillende grootheden: stroomsnelheid en druk, waarbij de

laatste grootheid het nul blok in (10.9) veroorzaakt. Een aanpak die de verschillen tussen de grootheden en de structuur in de matrix respecteert blijkt zeer succesvol.

In Hoofdstuk 6 vergelijken we een aantal preconditioners uit de literatuur (o.a. SIMPLE(R), en preconditioners van Wathen, Elman en Silvester) met twee nieuwe preconditioners, die geïnspireerd zijn door tijdsafhankelijke methoden. Een preconditioner gebruikt grad-div stabilisatie, de andere artificiële compressibiliteit. In alle gevallen gaat het om preconditioners die de snelheden anders behandelen dan de druk. Via eigenwaarden analyses en numerieke experimenten laten we zien dat de nieuwe preconditioners competitief zijn op uiteenlopende zadelpuntproblemen, waaronder een zadelpuntprobleem uit de oceaanmatrix.

Preconditionering in het oceaan model

Geïnspireerd door het succes van de structurele aanpak bij zadelpuntproblemen, hebben we onderzocht of we die aanpak ook op de oceaanmatrix kunnen toepassen. In Hoofdstuk 7 beschrijven we de nieuwe preconditioner die het resultaat is van dat onderzoek. In het oceaanmodel spelen zes verschillende grootheden een rol. We kunnen ze nog wel enigszins groeperen. De stroomsnelheden in het horizontale vlak hebben veel overeenkomsten. Hetzelfde geldt voor de temperatuur en het zoutgehalte. Deze twee types grootheden verschillen echter wezenlijk van de stroomsnelheid in de diepte en de druk. Die vier groepen grootheden worden na elkaar opgelost. De deelmatrices die we moeten oplossen in plaats van de grote oceaanmatrix, zijn eenvoudiger en goed te behandelen voor MRILU. De nieuwe preconditioner is goedkoper te bouwen, eenvoudiger toe te passen en zuiniger in het geheugengebruik.

In Hoofdstuk 8 laten we de prestaties van de nieuwe preconditioner zien op een aantal serieuze oceaanproblemen. De conclusie is eenduidig: dankzij de nieuwe preconditioner kunnen we de stromingen sneller berekenen, en ook nog eens op een fijner rooster, waardoor de nauwkeurigheid van de berekende oplossing veel beter is. Hoewel het moeilijk is om precies in een getal aan te geven wat de winst is, kunnen we met zekerheid zeggen dat we een orde van grootte sneller kunnen rekenen dan met de oude code. Waarmee het hoofddoel van dit onderzoek is bereikt.

Conclusie

Terug naar het begin van deze samenvatting, waarin het berekenen van de stabiliteit van de globale oceaanstroming centraal stond. Het nieuwe algoritme voor het oplossen van de vergelijkingen uit het oceaanmodel, zoals met name beschreven in de Hoofdstukken 7 en 8, is een grote stap vooruit. Doordat vergelijkingen veel sneller kunnen worden opgelost, kunnen we de grootschalige berekeningen doen, die nodig zijn om beter te kunnen voorspellen hoe de oceaan zal reageren op verstoringen.