Du modèle LCT au code opérationnel Tolosa.

Fred Couderc[1], avec Rémy Baraille,
Arnaud Duran, Jean-Paul Vila,
Gael Richard, Maya Ciavaldini
et Pascal Noble.

[1]IR CNRS,
Institut de Mathématiques de Toulouse.

Journées JMVPR
4-6 Octobre 2023

Introduction

Contexte

- `Tolosa` est une bibliothèque de codes écrit en **Fortran 2008** pour simuler des écoulements à surface libre, en particulier pour l'océanographie côtière et l'hydraulique.
  - Utilisant des **modèles (Tolosa-sw, Tolosa-lct ou Tolosa-euler)** et **des schémas numériques originaux** sur **maillages non structurés.**
  - Calculs efficaces et parallèles **CPU MPI** (hybride **CPU MPI/OpenMP** et **GPU MPI** en cours) avec tous les **aspects I/O**.
- Les codes sont aujourd'hui utilisés de manière opérationnelle au SHOM et chez Météo France pour la vigilance vagues-submersion (bascule en cours).
- Il est aussi utilisé à des fins plus académiques comme pour étudier les gaz de solitons au LEGI Grenoble ou les modèles de turbulence lisse de Gael Richard et Jean-Paul Vila, etc ...

Contrainte

Trouver **les meilleurs compromis** entre formalisme mathématique rigoureux et réalité opérationnelle nécessitant des schémas peu diffusifs avec une grande efficacité de calcul.

Tolosa-lct

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u}) &= 0\\
\frac{\partial (h\hat{\mathbf{u}})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\hat{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{u}) &= -gh\boldsymbol{\nabla}(h+b) - \boldsymbol{\nabla}(hp) - \frac{3}{2}p\boldsymbol{\nabla} b + \frac{1}{4}h\dot{b}\boldsymbol{\nabla}\dot{b}\\
\frac{\partial (h\hat{w})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\hat{w}\mathbf{u}) &= \frac{3}{2}p + \frac{\alpha-1}{2\alpha}gh^2\operatorname{div}(\mathbf{s}) + 4\frac{\alpha-1}{\alpha^2}\left(w-\dot{b}\right)^2 - (\alpha-1)h^2\det(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u})\\
\frac{\partial (hp)}{\partial t} + \operatorname{div}(hp\mathbf{u}) &= -a^2\left(2w + \alpha h\operatorname{div}(\mathbf{u}) - 2\dot{b}\right)\\
\frac{\partial (h\mathbf{s})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{s}\otimes\mathbf{u}) &= 2h\boldsymbol{\nabla} w + \frac{2}{\alpha}w\mathbf{s} + 2\frac{2-\alpha}{\alpha}w\boldsymbol{\nabla} b + (\alpha-2)h\boldsymbol{\nabla}\dot{b}\\
&\quad + ((\alpha-2)\boldsymbol{\nabla} b - \mathbf{s}).\left(h\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u} - h\operatorname{div}(\mathbf{u})\mathbf{I} + \frac{2}{\alpha}\dot{b}\mathbf{I}\right)
\end{aligned}
$$

- Partie acoustique (si $a \to \infty$, alors $\omega^2\left(1 + k^2H^2/3\right) = gHk^2$).
- Termes de correction bathymétrique pour pente « forte » (si sans alors $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$ et $\hat{w} = w$).
- Modèle augmenté du vecteur $\mathbf{s} \sim \boldsymbol{\nabla} h$ améliorant la relation de dispersion (Si $\alpha = 1.2$, donne l'approximation de Padé (2,2) de la relation de dispersion des vagues au sens de Airy).

Energie totale du système : $E = \frac{1}{2} gh(h+b) + \frac{1}{2} h \|\mathbf{u}\|^2 + \frac{1}{2} hw^2 + \frac{1}{2a^2} hp^2$

Partie Saint-Venant

$$\begin{cases} \dfrac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u}) = 0 \\ \dfrac{\partial (h\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -gh\boldsymbol{\nabla}(b+h) \\ \dfrac{\partial (hw)}{\partial t} + \operatorname{div}(hw\mathbf{u}) = 0 \\ \dfrac{\partial (hp)}{\partial t} + \operatorname{div}(hp\mathbf{u}) = 0 \end{cases}$$

Partie acoustique

$$\begin{cases} \dfrac{\partial h}{\partial t} = 0 \\ \dfrac{\partial (h\mathbf{u})}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}(hp) = 0 \\ \dfrac{\partial (hw)}{\partial t} = \dfrac{3}{2} p \\ \dfrac{\partial (hp)}{\partial t} = -a^2 (2w + h\operatorname{div}(\mathbf{u})) \end{cases}$$

Bilan d'énergie

$$\partial_t E + \operatorname{div}\left(\left(E + \frac{1}{2} gh^2\right)\mathbf{u}\right) = 0$$

Bilan d'énergie

$$\partial_t E + \operatorname{div}(hp\mathbf{u}) = 0$$

Schéma de « base »

$$\begin{cases} h_K^{n+1} = h_K^n - \dfrac{\Delta t}{m_K} \displaystyle\sum_{e\in\partial K} F_e^n m_e \\[2ex] h_K^{n+1}\mathbf{u}_K^{n+1} = h_K^n\mathbf{u}_K^n - \dfrac{\Delta t}{m_K} \displaystyle\sum_{e\in\partial K} \left(\mathbf{u}_K^n (F_e^n)^+ + \mathbf{u}_{K_e}^n (F_e^n)^-\right) m_e - \dfrac{\Delta t}{m_K} h_K^n \displaystyle\sum_{e\in\partial K} \Phi_e^{n,*}\mathbf{n}_{e,K} m_e \\[2ex] h_K^{n+1}w_K^{n+1} = h_K^{n+1}w_K^{n+1} - \dfrac{\Delta t}{m_K} \displaystyle\sum_{e\in\partial K} \left(w_K^n (F_e^n)^+ + w_{K_e}^n (F_e^n)^-\right) m_e \\[2ex] h_K^{n+1}p_K^{n+1} = h_K^{n+1}p_K^{n+1} - \dfrac{\Delta t}{m_K} \displaystyle\sum_{e\in\partial K} \left(p_K^n (F_e^n)^+ + p_{K_e}^n (F_e^n)^-\right) m_e \end{cases}$$

avec,

$$F_e^n = \frac{1}{2}\left(h_K^n\mathbf{u}_K^n + h_{K_e}^n\mathbf{u}_{K_e}^n\right).\mathbf{n}_{e,K} - \Pi_e^n, \quad \Phi_e^n = \frac{1}{2}\left(\Phi_K^n + \Phi_{K_e}^n\right) - \Lambda_e^n$$

Schéma explicite avec toutes les variables colocalisées (l'implicite est possible aussi) qui mélange des discrétisations centrées avec une partie décentrée.

A trouver les expressions de Π_e^n et de Λ_e^n pour assurer la dissipation de l'entropie.

Bilan d'énergie discret

$$E_K^{n+1} - E_K^n + \frac{\Delta t}{m_K}\sum_e m_e F_e = \frac{1}{2} g\left(h_K^{n+1} - h_K^n\right)^2 + \frac{1}{2} h_K^{n+1}\left\|\mathbf{u}_K^{n+1} - \mathbf{u}_K^n\right\|^2$$

$$+\frac{\Delta t}{m_K}\sum_e \frac{1}{2}\left\|\mathbf{u}_{K_e}^n - \mathbf{u}_K^n\right\|^2 \left(F_e^n.\mathbf{n}_{e,K}\right)^- m_e$$

$$-\frac{\Delta t}{m_K}\sum_e \left(\frac{h_{K_e}^n \mathbf{u}_{K_e}^n - h_K^n \mathbf{u}_K^n}{2}\right).\mathbf{n}_{e,K}\Lambda_e^n m_e - \frac{\Delta t}{m_K}\sum_e \boldsymbol{\delta\phi}_e^n.\Pi_e^n m_e$$

Choix des termes de dissipation

En posant $\Pi_e^n \sim \gamma\Delta t\left(\frac{m_{\partial K}}{m_K} h_K + \frac{m_{\partial K_e}}{m_{K_e}} h_{K_e}\right)\delta\phi_e^n$ et $\Lambda_e^n \sim \alpha g\Delta t\left(\frac{m_{\partial K}}{m_K} + \frac{m_{\partial K_e}}{m_{K_e}}\right)\delta\left(h_e^n \mathbf{u}_e^n\right).\mathbf{n}_{e,K}$ alors sous la condition d'une « loi locale » pour γ et α et d'une condition classique de type CFL, **l'entropie est dissipée**.

Calibration des constantes de stabilité en pratique

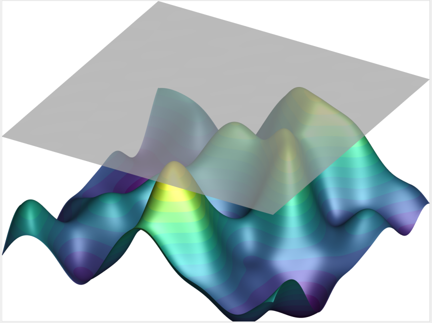
Analyse de stabilité linéaire sur maillage 1D/2D cartésiens

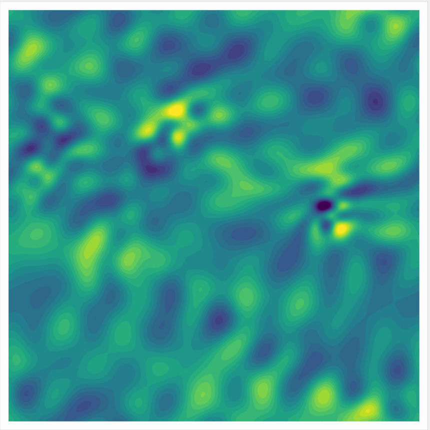
- Afin de trouver des **conditions nécessaires et suffisantes**, nous dérivons des études de stabilité au sens de Von Neumann en employant une norme énergie $< U, EU >= \sum_{K \in T} \frac{1}{2} g h_K^2 + \frac{1}{2} h_K \left\| \mathbf{u}_K \right\|^2$ (Kreiss matrix theorem).
- Le **déterminant de Gram** des vecteurs propres normalisés est une autre technique permettant de trouver les mêmes conditions.
- C'est une classe de schémas, de nombreuses variantes sont envisagées, et les coefficients de stabilisation $\boldsymbol{\gamma}$ et $\boldsymbol{\alpha}$ ne sont **pas nécessairement constant** mais peuvent être dépendant du Froude et/ou de la CFL locale.

Equations équivalentes

- Renseignent non seulement sur la calibration des constantes mais donnent aussi des informations comportementales et l'ordre de la méthode.
- Mais très vite limité en plus d'être contestable d'un point de vue formel.

Cas test pour la partie Saint-Venant (1/3)





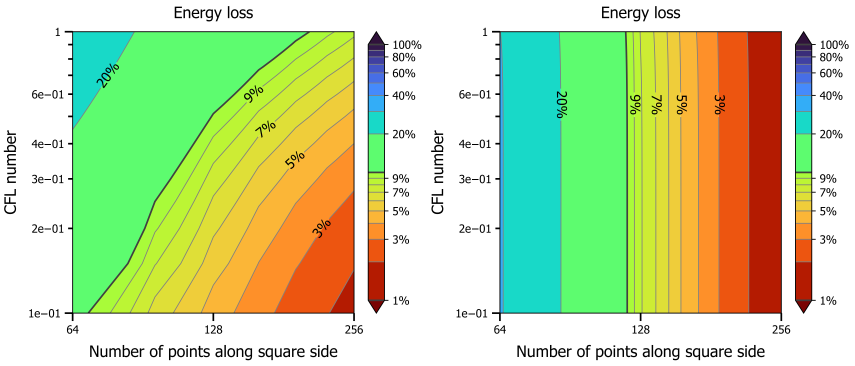


Fig. : (à gauche) schéma de base bas Froude (à droite) schéma classique Rusanov/RK2/Muscl

Cas d'un maillage avec des carrés « coupés en 2 »

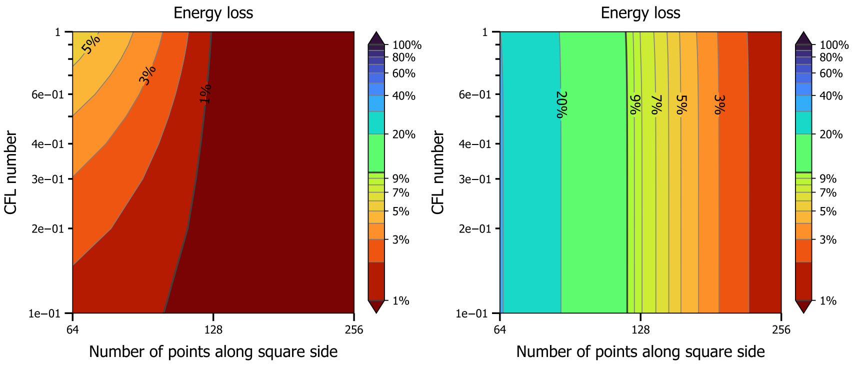


Fig. : (à gauche) schéma de base bas Froude (à droite) schéma classique Rusanov/RK2/Muscl

Cas d’un maillage avec le mailleur par défaut de gmsh (Frontal-Delaunay).

Partie acoustique

$$\begin{cases} h_K^n \mathbf{u}_K^{n+1} & = & h_K^n \mathbf{u}_K^n - \Delta t \boldsymbol{\nabla}_K^c \left(h^n p^{n+1} \right) \\ h_K^n w_K^{n+1} & = & h_K^n w_K^n + \dfrac{3\Delta t}{2} p_K^{n+1} \\ h_K^n p_K^{n+1} & = & h_K^n p_K^n - a^2 \Delta t \left(2 w_K^{n+1} + h_K^n \boldsymbol{\nabla}_K^c . (\mathbf{u}^*) \right) \\ & & \text{avec} \quad \mathbf{u}_e^* = \mathbf{u}_e^n - \Delta t \dfrac{\beta}{2} \left(\dfrac{m_{\partial K}}{h_K^n m_K} + \dfrac{m_{\partial K_e}}{h_{K_e}^n m_{K_e}} \right) \boldsymbol{\delta}_e (h^n p^n) \end{cases}$$

Dissipation de l'entropie

$$E^{n+1} - E^n + \frac{\Delta t}{m_K} \sum_e m_e F_e = \frac{1}{2} h_K^n \left\| \mathbf{u}_K^{n+1} - \mathbf{u}_K^n \right\|^2 - \frac{2}{3} h_K^n \left(w_K^{n+1} - w_K^n \right)^2 - \frac{h_K^n}{2a^2} \left(p_K^{n+1} - p_K^n \right)^2$$

$$+ \beta \Delta t^2 h_K^n p_K^{n+1} \boldsymbol{\nabla}_K . (\mu \boldsymbol{\delta} (h^n p^n))$$

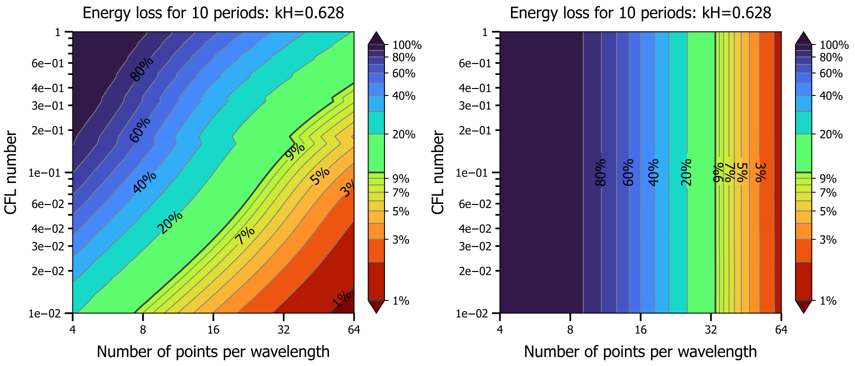
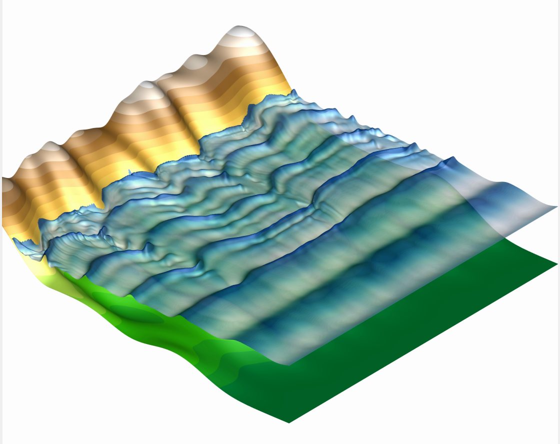


FIG. : (à gauche) splitting + schéma bas Froude $\Delta t \sim \Delta x/\sqrt{gH}$ (à droite) autre splitting « hybride » de type IMEX + schéma Rusanov/Muscl $\Delta t \sim \Delta x/\sqrt{gH + a^2}$.

Complexité algorithmique

Le coût de calcul d'un pas de temps est ~ 6x plus important pour le splitting « hybride » en plus de nécessiter ~ 3/8x plus de pas de temps.



- Interpolation des flux avec un schéma de bas ordre très diffusif avec toutes les bonnes propriétés mathématiques.
- L'acoustique est « coupée » suivant la même idée en flaguant les cellules où $h_K < h_\epsilon$ puis en disséminant de proche en proche pour interpolation suivant 3 à 5 cellules.

HPC et performance (version Saint-Venant)

CPU MPI

- Scalabilité proche de 50% sur **un noeud 128 coeurs du supercalculateur Belenos de Météo France** avec une performance de 1.3 $ns/dt/dx$ par noeud.
- Soit ~750 pas de temps par seconde pour une maillage de 10^6 triangles.

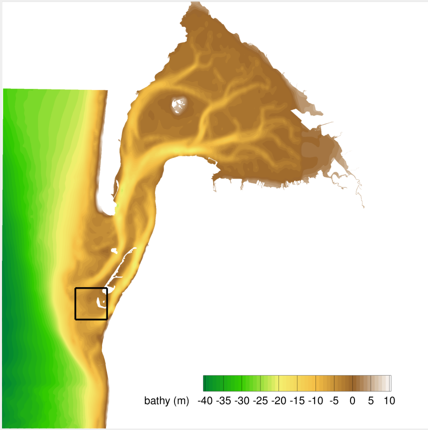
CPU hybride MPI/OpenMP

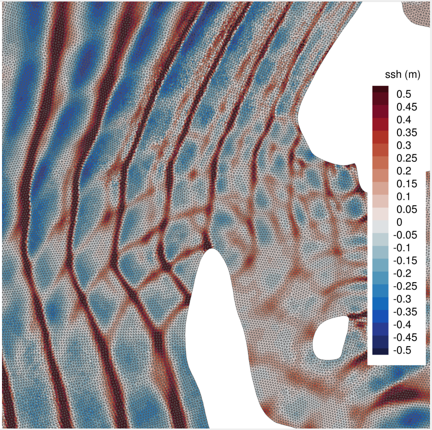
- En cours de développement pour obtenir une meilleure scalabilité, avec un gain potentiel du double de pas temps réalisés par seconde.

GPU MPI

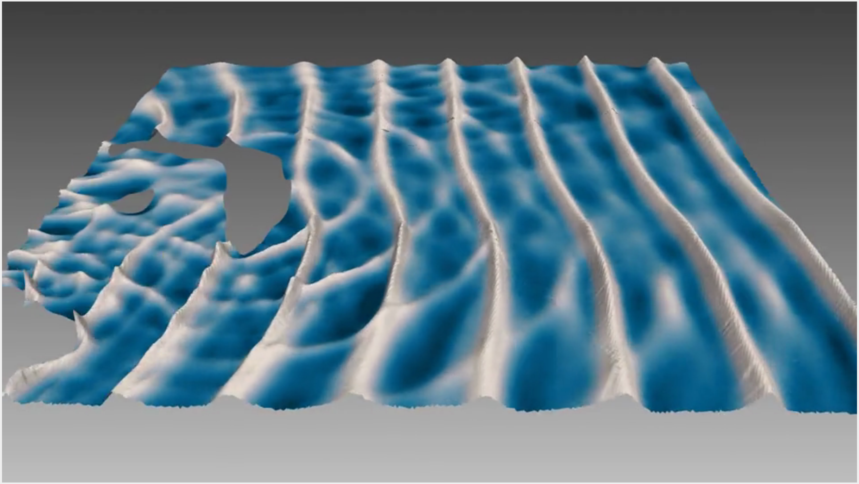
- Version de code minimaliste pour résoudre les équations de Saint-Venant portée sur **une carte GPU A100** avec une performance de 0.3 $ns/dt/dx$ par carte.
- Soit ~3000 pas de temps par seconde pour une maillage de 10^6 triangles.

Cas test de Arcachon (1/2)





- Une onde monochromatique est imposée sur la partie gauche du domaine de manière *ad hoc* en imposant la hauteur d'eau et des conditions de Neumann pour les autres variables (invariant de Riemann normal pour **u** et simple pour w et p).
- Maillage de ~ 8M de cellules, ~ 11h de calcul sur 144 coeurs (4 noeuds au Calmip Toulouse) pour 5h physique de simulation (~11 $ns/dt/dx$ par noeud).



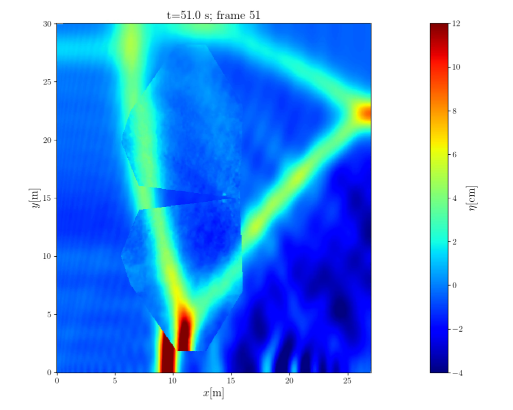
- Schémas possédant un **très bon ratio entre précision et coût informatique**.
- Manque général de **robustesse aux maillages à étudier**, notamment en utilisant des techniques de gradient renormalisé.
- Des **versions alternatives en cours de développement**, notamment à 2 étapes ou de type prédicteur/correcteur (que ce soit de type Runge-Kutta, Lax-Wendroff ou complètement hybride), et/ou en incluant des reconstructions de type MUSCL (schémas en théorie d'ordre 4 potentiellement).
- Des **conditions aux limites plus robustes à developper** dans le cas du modèle LCT.
- Inclusion de **plus de physique dans la modélisation**, notamment l'aspect déferlement et dissipation des vagues (voir l'exposé de Hung).
- **Potentiel académique** des codes développés largement **sous exploité**.

Merci.

Des questions ?

Bonus

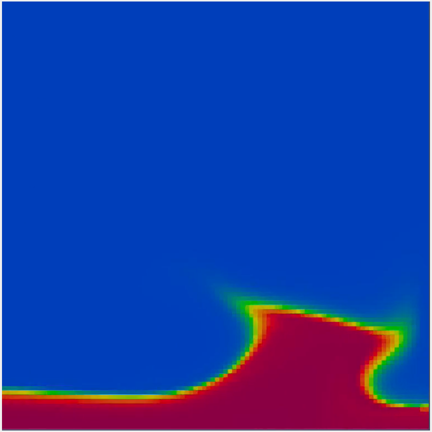
Expérience de laboratoire au LEGI



Comparaison expérience (zones polygonales au milieu)/numérique

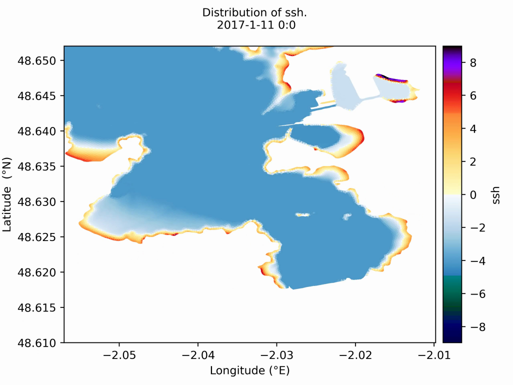
- Une version ALE du code a été développée afin de simuler des batteurs dans un bassin (de l'ordre de 30m de côté).
- Excellent accord entre l'expérience et la simulation numérique.

Tolosa-Euler



Un solveur diphasique des équations d'Euler est en cours de développement avec prise en compte de la dimension verticale par intégration directe (n couches) en utilisant une méthode ALE.

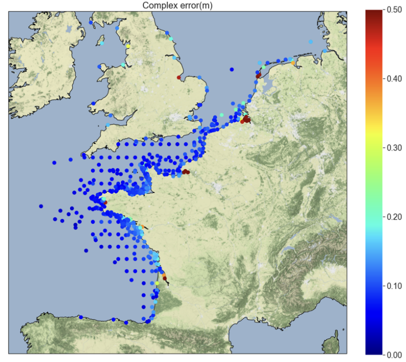
Prévision de la surcote à Météo France (1/2)



Cahier des charges

Une prévision sur 5 jours en 15 minutes de calcul sur une dizaine de noeuds de calcul du supercalculateur Belenos (~700 coeurs).

Prévision de la surcote à Météo France (2/2)



	HYCOM	TOLOSA
DUNKERQUE	0.35	0.09
CALAIS	0.39	0.11
BOULOGNE-SUR-MER	0.39	0.10
CHERBOURG	0.19	0.08
LE_HAVRE	0.28	0.08
ROSCOFF	0.25	0.07
SAINT-MALO	0.18	0.12
BREST	0.26	0.15
LE_CONQUET	0.38	0.08
CONCARNEAU	0.25	0.08
LE_CROUESTY	0.25	0.12
SAINT-NAZAIRE	0.28	0.19
LES_SABLES-D_OLONNE	0.28	0.13
LA_ROCHELLE-PALLICE	0.34	0.17
PORT-BLOC	0.24	0.12
ARCACHON_EYRAC	0.18	0.11
BOUCAU-BAYONNE	0.21	0.13
SOCOA	0.25	0.05
GLOBAL	N/A	0.14
MEAN_SELECTED	0.28	0.11

Erreur complexe réduite d'un facteur 2,5

Amélioration du déphasage et de l'ensemble des indicateurs statistiques pour la majorité des stations

Performance

- Nette amélioration vs le code opérationnel HYCOM.
- Pour prédire les surcotes, les forçages atmosphériques sont rajoutés dans la grande chaîne de calcul de Météo France.