

Évolutions d'un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour la simulation du déferlement de vagues

Stéphane Glockner, Pierre Lubin

Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux I2M
IPB – Université de Bordeaux - CNRS UMR 52 95
16, av. Pey-Berland
33607 Pessac Cedex
glockner@ipb.fr ; p.lubin@i2m.u-bordeaux1.fr

Overview

Numerical simulation of air/water coastal applications are still a very challenging goal to achieve since small interface deformations, air entrainment, very active turbulence and vorticity generation are involved. The accuracy of the whole physical process description is closely linked to the mesh grid size. Parallel computing will enhance access to a better level of description of the turbulent behaviour of the entrained and rising air bubbles, providing refined mesh grids are used to ensure an accurate free surface description. An history of the code is presented here, its evolution on different supercomputers as well as its performances which allow for the very first time the study of fine air filament in the breaking waves phenomenon.

Enjeux scientifiques, besoin en calcul, stockage et visualisation

La simulation numérique du déferlement des vagues est encore un challenge scientifique en raison des petites déformations de l'interface air/eau, de l'entraînement de l'air dans l'eau, d'une turbulence très active et de la génération de vorticit . C'est une probl matique tr s exigeante au niveau de la pr cision des m thodes num riques et du calcul scientifique intensif. En effet, la pr cision de la description de ce ph nom ne physique est  troitement li    la taille du maillage utilis . Le calcul parall le permet une meilleure description de l'interface et donc du comportement turbulent de l'entraînement de l'air et de la remont e des structures a r es. Ainsi, nous avons mis en  vidence, pour la premi re fois, de fins filaments de vortex g n r s durant la p riode initiale du d ferlement. Jusqu'  pr sent il n'existe pas de r sultats d'exp rience de laboratoire sur le sujet, et ces structures ont  t  seulement visualis es lors de reportages video grand public [1]. Ces fines structures coh rentes sont des tubes de vorticit  a r s, de fins filaments connectant le splash-up au rouleau principal, allong s dans la direction principale de l' coulement. Les besoins en stockage et visualisation en d coulent, le volume de donn es d'une simulation repr sentant plusieurs To   stocker, transf rer et post-traiter, avec pour partie de la visualisation exploratoire car nous cherchons   identifier et comprendre des structures non  tudi es jusqu'ici.



Figure 1. Vues sous-marines de vagues d ferlantes. Lorsque les vagues d ferlent et se propagent vers le rivage, de l'air est entra n  sous l'eau. On peut voir des structures tourbillonnaires inhabituelles, telles des tornades qui se courbent et s'enroulent. Sur ces deux images, on observe le tube d'air se propageant vers le rivage de la gauche vers la droite. Sur la droite, on peut voir l' cume cr e par les impacts des vagues d ferlantes. Ces images sont utilis es avec la permission des photographes (a) Chris Bryan and (b) Mark Tipple (<http://www.theunderwaterproject.com>).

D veloppements, utilisation des infrastructures

Les simulations num riques sont bas es sur le code de m canique des fluides Th tis (<http://thetis.enscbp.fr>) d velopp  depuis 20 ans   l'I2M. Il repose sur la r solution des  quations de Navier-Stokes sur des maillages cart siens par la m thode des volumes finis. Il utilise une mod lisation 1-fluide et une m thode VOF-PLIC pour le transport de l'interface air/eau. Il a donn  des r sultats satisfaisants sur de nombreuses applications c ti res, e.g. le d ferlement des vagues, la propagation du mascaret, la g n ration et le d ferlement de tsunamis, les  coulements de swash, etc. [2,3,4,5,6,7]. Avec la d mocratisation des clusters et l'explosion des moyens de calcul (CINES-jade 2007), Th tis a  t  parall lis  en 2005 avec le double

objectif de gagner du temps de calcul et d'augmenter la taille des simulations, et donc la qualité scientifique des résultats. Le choix s'est vite porté sur un partitionnement initial du domaine et une répartition des charges et des calculs associés sur les cœurs, les échanges de données étant gérés par la librairie MPI. Cela assure au code un caractère généraliste et une portabilité pouvant tirer partie du simple PC tout autant que du supercalculateur à plusieurs milliers de processeurs. Depuis 2005, pour ce projet et plus généralement ceux de l'I2M-TREFLE utilisant Thétis, nous nous sommes progressivement appuyés sur l'ensemble de la chaîne pyramidale du calcul scientifique en France :

- Calculateurs de laboratoire : ALTIX 2000 de 12 cœurs (2005), Linux Networks de 128 cœurs AMD (2007), SGI ICE de 256 cœurs (2009), SGI UV 2000 de 432 cœurs (2013) ;
- Mesocentre MCIA (Université de Bordeaux) : IBM Power (2007), Cluster Vision de 3000 cœurs (2012), [8] ;
- Centre nationaux : projet GENCI CINES (jade), TGCC (titane), quelques millions d'heures CPU / an ;
- Projet européens PRACE : preparatory access [9,10] (2013), 6th regular call (2013, 13 millions d'heures CPU pour la simulation du déferlement des vagues, [11]).

Outils, le cas échéant complémentarité des ressources, difficultés rencontrées

Le choix en 2005 de la parallélisation de Thétis par MPI s'est fait par soucis d'efficacité possible sur les calculateurs les plus évolués, l'existence de librairie de solveurs de systèmes linéaires efficaces (Hypre [12], MUMPS), des moyens humains à disposition pour faire évoluer le code. Cette stratégie s'est avérée payante, puisque nous sommes passés d'un code de production sur quelques centaines de milliers de points à quelques centaines de millions maintenant. Plusieurs étapes ont été nécessaires :

- partitionnement du domaine et écriture solveur BiCGStab(2) parallèle avec un préconditionnement ILU(0) basique ;
- changement d'approche pour la résolution du couplage vitesse/pression avec le passage de la méthode du lagrangien augmenté à la méthode de correction de pression conduisant à des systèmes linéaires plus favorables au recours au calcul intensif ;
- couplage avec les librairies de solveurs MUMPS et Hypre pour plus d'efficacité ;
- I/O parallèles, changement de logiciel de post-traitement (Tecplot pour Paraview), résolution de quelques goulots d'étranglement pour le passage à l'échelle (1 milliard de points sur 16 384 cœurs).

Les figures suivantes montrent la bonne scalabilité (forte et faible) du code dans son ensemble et de ses différentes parties sur les machines Avakas du MCIA (nœuds Intel Westmere à 12 cœurs, 3 168 cœurs) et Curie du TGCC (nœud Intel Sandy Bridge à 16 cœurs, 80 640 cœurs).

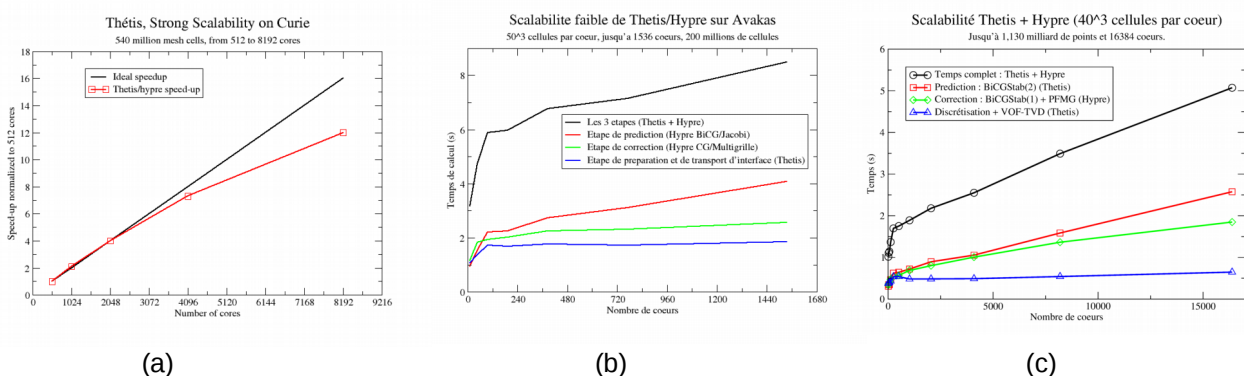


Figure 2 : (a) courbe de scalabilité forte de Thétis+Hypre sur Curie (TGCC) (b), (c) étude de scalabilité faible sur Avakas (MCIA) et Curie (TGCC) pour Thétis et Hypre avec 40x40x40 cellules par cœur (jusqu'à 1.1 milliard de points sur 16 384 cœurs sur Curie). Le temps est le maximum des temps mesurés par MPI_WTIME sur tous les cœurs dans différentes parties du code : (1) la boucle en temps dans sa totalité (Thétis+Hypre) ; (2) l'étape de prédiction (Thétis – solveur BiCGStab(2)) ; (3) l'étape de correction (Hypre – solveur BiCGStab avec préconditionnement multigrille) ; (4) autres parties de la boucle en temps (Thétis). On a (1)=(2)+(3)+(4)

L'efficacité du calcul engendre la génération de volumes de données croissants, qu'il faut transférer de la mémoire vive au système de stockage parallèle du supercalculateur, puis au système de stockage final sur lequel s'effectue la visualisation. Jusqu'à quelques millions de points, la solution basique consistant à

collecter les données sur un processeur chargé de l'écriture sur disque était satisfaisante et n'avait pas d'impact significatif sur le temps de calcul total. L'étape suivante a consisté, dans le cadre du projet PRACE PA2009 [9] à réaliser un passage à l'échelle pour les I/O en mettant en œuvre des I/O parallèles. Nous avons choisi l'approche POSIX parallèle où chaque processeur génère un fichier contenant les données associées au sous-domaine qui lui est attribué. Les fichiers sont générés pour Paraview/Visit au format VTK (fichiers d'extension .pvts et .vts pour des maillages structurés). La figure 3 montre les bonnes performances obtenues, pour des grilles allant de 40^3 à 70^3 points par cœur, de 16 à 8192 cœurs. Les valeurs min_SAR and max_SAR se réfèrent aux définitions des débits agrégés soutenus minimum et maximum de [13].

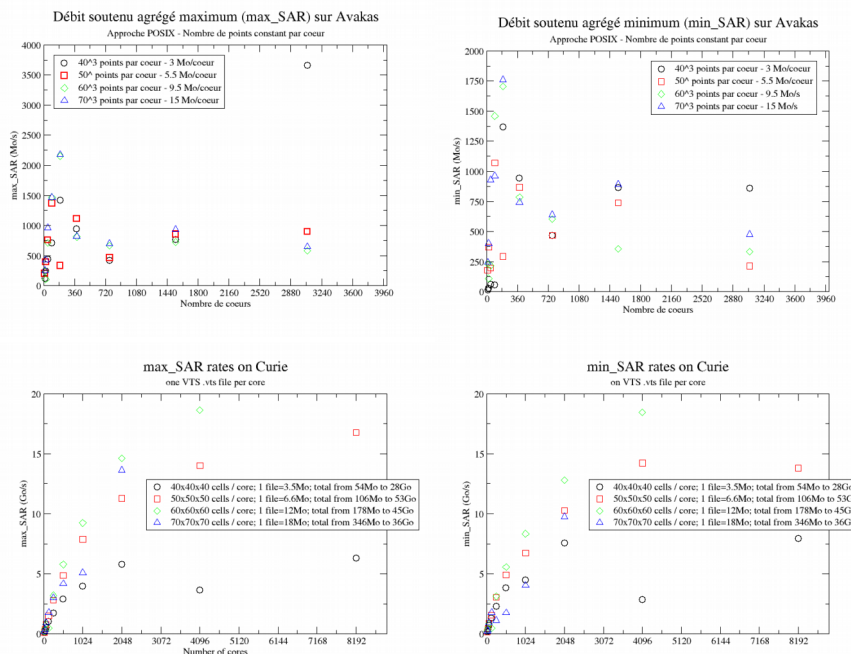


Figure 3 : débits agrégés soutenus minimum et maximum obtenus avec l'approche POSIX I/O sur Avakas (MCIA) et Curie (TGCC).

Si écrire les données sur disque s'avère donc efficace avec la méthode choisie, la visualisation des résultats implique leur transfert vers un serveur local (à moins d'opérer une visualisation à distance que nous n'avons pas encore testée). Une fois les pare-feux contournés, étape indispensable au risque de voir les débits chuter drastiquement, le transfert des données (4To par exemple) se fait tout de même en une quinzaine d'heure sur le campus Bordelais (60-80Mo/s) et entre 45 et 60h depuis le TGCC (20-30Mo/s). La visualisation interactive n'est pas non plus sans difficultés rencontrées. Le travail a été ici très exploratoire car nous devons comprendre, expliquer un phénomène non-encore étudié. L'interactivité de la visualisation est alors indispensable et requiert, pour le volume de données d'une itération en temps, le recourt à la visualisation parallèle sur 8 cœurs. Le traitement de l'ensemble des données se fait lui en batch afin de le rendre automatique. Il faut noter qu'une simulation de 86 millions de points sur Avakas sur 576 processeurs représente plus de 460 000 fichiers VTK. Le point bloquant a été pour notre système local un peu vieillissant la lecture et le traitement CPU des données sur seulement 8 cœurs, plutôt que le traitement GPU. Pour les plus grosses simulations de 600 millions de points sur Curie sur 4 096 processeurs, cela représente plus de 4 000 000 de fichiers VTK (non encore complètement exploités).

Résultats scientifiques

Quand une vague se propage vers le rivage, elle change de forme et perd son aspect symétrique du fait de la diminution de la profondeur d'eau. Une fois que la vague se dresse, un jet d'eau est propulsé de la crête vers l'avant de la vague. Ce jet d'eau va impacter la face avant de la vague dans ce mouvement caractéristique de retournement. Une grande poche d'air est formée et entraînée sous l'eau. Cette structure aérée est mise en rotation par le mouvement de retournement de l'eau qui l'enveloppe. L'impact du jet d'eau va générer un autre jet secondaire, appelé « splash-up ».

Pour identifier et visualiser les filaments de vortex, nous utilisons le critère Q (qui est le second invariant du tenseur du gradient de vitesse) qui va nous permettre d'analyser l'évolution des structures dans l'espace au cours du temps. On peut voir (figure 4a) que les structures tourbillonnaires aérées coïncident avec les structures cohérentes identifiées par le critère Q [14,15]. On peut voir aussi que les vortex sont régulièrement espacés et semblent régulièrement organisés. Ces fine structures ressemblent à des côtes,

reliant le splash-up et le tube d'air formé lors du retournement de la vague. L'entraînement de l'air coïncide avec les structures identifiées par le critère Q , alors qu'il semble aspiré au cœur des vortex. La figure 4a montre aussi le mouvement de spirale de l'eau, confirmant la présence de ces filaments de vortex sous les vagues déferlantes.

Nous étudions actuellement les mécanismes de générations de ces vortex [15]. Une étude paramétrique est en cours afin de confirmer ces premières observations en faisant varier la cambrure et hauteur de la vague. Ainsi plusieurs intensités de déferlement sont étudiées pour détailler les conditions de création de ces filaments, leur génération et développement (taille, espace entre les filaments, interactions, entraînement de l'air, etc.). La figure 4b montre pour cette étude l'intérêt du calcul intensif et de l'architecture pyramidale des moyens matériels par une description plus fine des structures rendue possible par l'accès à des systèmes de plus en plus performants.

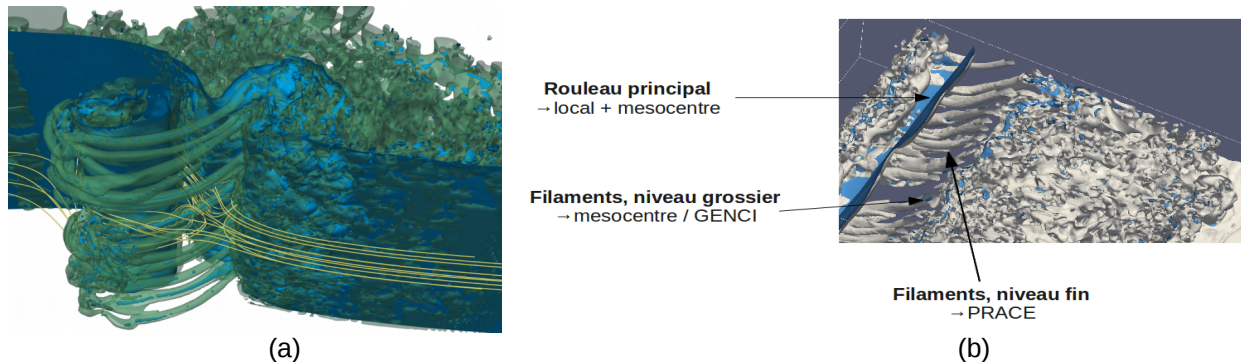


Figure 4 : (a) Structures tourbillonnaires cohérentes sous la vague déferlante. L'enveloppe des vortex est visualisée par l'isovaleur $Q = 1$ (en vert) ; la surface libre est identifiée par l'isovaleur de la fonction de phase (en bleu), indiquant l'entraînement de l'air ; les lignes de courant indiquent le mouvement de spirale autour d'un filament de vortex aéré. (b) Mise en évidence de l'intérêt du calcul intensif et de l'architecture pyramidale des moyens matériels.

Perspectives

Malgré ces résultats, certaines simulations de déferlement plus intenses ont montrés les limites actuelles de nos méthodes notamment au niveau du modèle 1-fluide et du traitement des conditions au niveau de l'interface. Le potentiel du code en terme de partitionnement, solveur, I/O est très certainement de l'ordre de quelques dizaines de milliards de points sur plusieurs dizaines de milliers de processeurs. Ce passage à l'échelle nécessite néanmoins un travail en cours sur le modèle 1-fluide et les méthodes numériques associées (conditions à l'interface d'ordre 2 en espace, méthode de transport d'interface). D'autre part, la course à la puissance passe par la multiplication des unités de calcul. L'option prise par Intel et ses co-processeurs Phy est pour nous intéressante. Les premiers travaux associés à la librairie Hypr sont encourageants [12] et vont donc dans le sens d'une programmation hybride MPI/OpenMP afin de continuer à tirer partie de l'évolution des moyens de calcul en France et en Europe. Enfin l'utilisation de Paraview (en local voire à distance) sur quelques dizaines de processeurs et un système de fichiers performant est nécessaire à la visualisation des simulations les plus lourdes.

Références

- [1] BBC 2009 South pacific, episode 1: Ocean of islands. DVD, executive Producer: Fiona Pitcher, Series Producer: Huw Cordey, BBC/Discovery Channel co-production. BBC Worldwide via Youtube: <http://www.youtube.com/watch?v=7BOhDaJH0m4>. Retrieved 2009-05-08.
- [2] P. Lubin, S. Glockner, O. Kimmoun, H. Branger, Numerical study of the hydrodynamics of regular waves breaking over a sloping beach. *Accepted dans European Journal of Mechanics B/Fluids*, 2011.
- [3] P. Lubin, H. Chanson, S. Glockner, Large Eddy Simulation of turbulence generated by a weak breaking tidal bore, *Environmental Fluid Mechanics*, Volume 10, Number 5, pp587-602, 2010.
- [4] P. Lubin, S. Glockner, H. Chanson, Numerical simulation of a weak breaking tidal bore, *Mechanics Research*, 37 1: 119-121, 2010.
- [5] M. Mory, S. Abadie, S. Mauriet, P. Lubin, Run-up flows of collapsing bores over a beach. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 30 (6), pp 565-576, 2011.

- [6] P. Lubin, S. Vincent, S. Abadie, J.-P. Caltagirone, Three-dimensional Large Eddy Simulation of air entrainment under plunging breaking waves. *Coastal Engineering*, 53 (8), pp 631-655, 2006.
- [7] S. Abadie, D. Morichon, S. Grilli & S. Glockner, Numerical simulation of waves generated by landslides using a multiple-fluid Navier–Stokes model *Coastal Engineering*, Volume 57, Issue 9, September 2010, pp779-794.
- [8] S. Glockner, P. Lubin., *Un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour l'étude du mascaret et le déferlement des vagues*, présentation orale, Journée Scientifiques du MCIA, 1er fév. 2013, Talence.
- [9] S. Glockner, P. Lubin., Massively Parallel Navier-Stokes Solver for Breaking Waves, PRACE Preparatory Access PA2009 – 9th, <http://www.prace-ri.eu/Preparatory-Access-9#TypeC>, July-Dec. 2012.
- [10] S. Glockner, N. Audiffren, H. Ouvrard, Porting and Evolution of THETIS on the Curie Supercomputer, PRACE Whitepapers, CFD applications, <http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp69.pdf>, 2013.
- [11] S. Glockner, P. Lubin., Massively Parallel Navier-Stokes Solver for Breaking Waves, PRACE 6th Regular Call, <http://www.prace-ri.eu/PRACE-6thRegular-Call?lang=en>, march 2013-march 2014.
- [12] A. Baker, R.D. Falgout, T.V. Kolev and U. Meier Yang “ Scaling hypre’s multigrid solvers to 100,000 cores”, from https://computation.llnl.gov/casc/linear_solvers/pubs/Baker-2010-scaling-hypre.pdf.
- [13] James C. French, Terrence W. Pratt and Mriganka Das “Performance Measurement of a Parallel Input/Output System for the Intel iPSC/2 Hypercube”, IPC-TR-91-002. *IN Proceedings of the 1991 ACM SIGMETRICS Conference on Measurement & Modeling of Computer Systems*, May, 1991.
- [14] P. Lubin, S. Glockner, Detailed numerical investigation of the three-dimensional flow structures under breaking waves, 7th conference on Coastal Dynamics, pp1127 – 1136, Arcachon, 24-28 june 2013.
- [15] P. Lubin, S. Glockner, Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves: generation and evolution of aerated vortex filaments, article soumis.