

Mise en place d'une nouvelle version de ProSe : ProSe-P

Shuaitao Wang^{1*}, Nicolas Flipo¹, Agnès Rivière¹, Thomas Romary¹

¹ Centre de Géosciences, MINES ParisTech, PSL Research University

* shuaitao.wang@mines-paristech.fr

Résumé

Le logiciel ProSe est utilisé largement dans le programme PIREN Seine afin de modéliser le fonctionnement biogéochimique de la Seine depuis l'amont de Paris jusqu'à l'estuaire. Mais il ne s'adapte pas au calcul en parallèle qui est efficace pour les simulations nécessitant un temps de calcul important, comme l'assimilation de données sur le temps long.

Ce rapport présente la version parallélisée du code : ProSe-P. les schémas numériques et la stratégie de parallélisation sont tout d'abord présentés. ProSe-P est ensuite validé par la comparaison des résultats d'une simulation de modèle Seine avec ceux de ProSe3.6.9. ProSe-P permet une réduction significative des temps de calcul, et est plus stable que l'ancienne version 3.6.9 pour ce qui concerne la modélisation du fonctionnement hydraulique et de l'oxygène dissous de la colonne d'eau.

Points clefs

- ✓ *Version parallélisée de ProSe opérationnelle qui permet de réduire significativement les temps de calcul pour l'assimilation de données*
- ✓ *Résolution du problème hydraulique plus stable*
- ✓ *Amélioration des échanges à l'interface air-eau*

Introduction

L'objectif de ce travail est de construire une version parallélisée du logiciel ProSe pour assimiler en continu les mesures d'oxygène dissous de la colonne d'eau, afin de notamment déterminer l'évolution temporelle des propriétés physiologiques des communautés d'espèces autotrophes et hétérotrophes ainsi que les incertitudes associées. Le modèle sera mis en œuvre sur les 220 km de Seine et Marne depuis l'amont de l'agglomération parisienne jusqu'à l'estuaire de la Seine soumis à de forts rejets anthropiques. Il s'agit du domaine simulé à l'échelle pluri-annuelle par Vilmin (2014).

Ce rapport présente la stratégie de construction de la nouvelle version de ProSe, ProSe-P, et ses performances. L'idée principale est de coupler les trois librairies : hydraulique, transport et biogéochimique (Fig. 1), et de réaliser un calcul en parallèle pour le transport des substances et un autre pour leur transformation par les processus biogéochimiques.

1. Librairie hydraulique *libhyd*

Cette librairie hydraulique (Vilmin, 2012) résout les équations de Saint-Venant à une dimension avec le schéma semi-implicite de Preissmann. Le système d'équation comprend la conservation de la masse et de la quantité de mouvement (eq (1) et (2)).

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (1)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) = -gA \left(\frac{\partial Z}{\partial x} - i \right) \quad (2)$$

Avec,

A : la surface mouillée, [m²]

Q : le débit, [m³.s⁻¹]

q : l’apport ou le prélèvement, [m³.s⁻¹]

Z : la cote de la surface libre, [m]

i : la pente hydraulique, calculée avec la formule de Manning-Strickler, [-], $Q = A \cdot K_s \cdot R_h^{3/2} \sqrt{i}$

x : la distance longitudinale, [m]

En faisant l’hypothèse d’une section de rivière dont la largeur (L) est grande devant la hauteur d’eau h , on peut estimer $A = hL$. Le système d’équation est alors discrétisé suivant un schéma numérique aux différences finies sur grille décalée, très proche d’un schéma aux volumes finis.

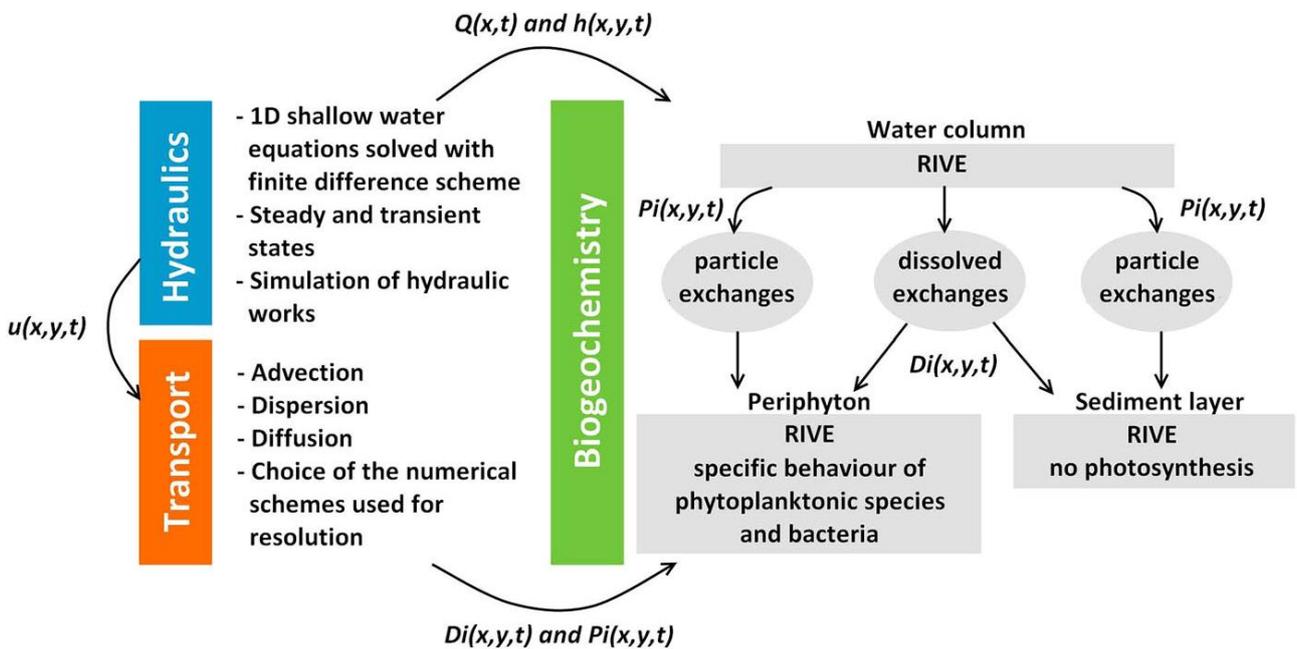


Figure 1. Schéma simplifié du logiciel ProSe (d’après Vilmin et al., (2015b))

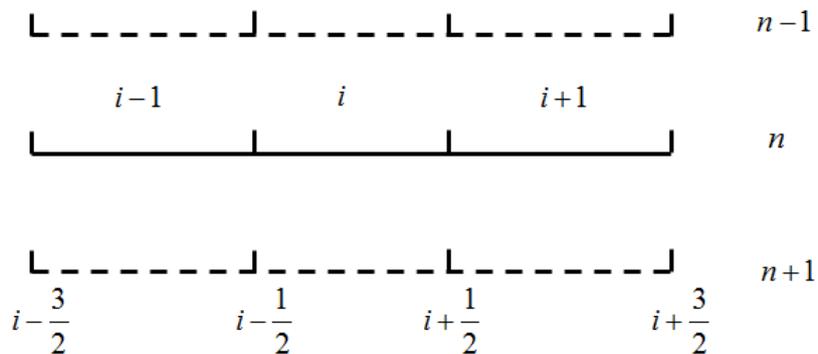


Figure 2. Les indices du schéma numérique

1.1. Discrétisation de l'équation de conservation de la masse

Le schéma numérique utilisé pour la discrétisation des équations est un schéma semi-implicite aux différences finies sur grilles décalées, très proche d'un schéma aux volumes finis. Les charges hydrauliques sont calculées au centre des cellules, et les débits aux faces (Fig. 2).

$$\frac{\partial(hL)}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (3)$$

Chaque terme de l'équation 3 est noté CMi (Eq. 4) et discrétisé pas à pas :

$$CM1 + CM2 = CM3 \quad (4)$$

$$CM1 = \left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial t} + L \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \right)_i$$

$$CM1 = \left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial t} + L \cdot \left(\frac{\partial Z}{\partial t} - \frac{\partial Z_f}{\partial t} \right) \right)_i$$

$$CM1 = \left(\frac{\partial Z}{\partial t} \right)_i \left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial Z} + L \right) \quad (5)$$

$$CM2 = \frac{Q_{i+\frac{1}{2}} - Q_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \quad (6)$$

En substituant l'équation (5) et l'équation (6) dans l'équation (3), on obtient :

$$\left(\frac{\partial Z}{\partial t} \right)_i = \frac{1}{\left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial Z} + L \right)_i} \left(-\frac{Q_{i+\frac{1}{2}} - Q_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} + q_i \right) \quad (7)$$

Dont la discrétisation temporelle est la suivante :

$$\begin{aligned} -\frac{\theta}{\Delta t} \cdot Q_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial Z} + L \right)_i^n}{\Delta t} \cdot Z_i^{n+1} + \frac{\theta}{\Delta t} \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \\ = \left(h \cdot \frac{\partial L}{\partial Z} + L \right)_i^n \cdot \frac{Z_i^n}{\Delta t} + \frac{(1-\theta) \cdot Q_{i-\frac{1}{2}}^n - (1-\theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_i} + \theta \cdot q_i^{n+1} + (1-\theta) \cdot q_i^n \end{aligned} \quad (8)$$

1.2. Discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement

En discrétisant spatialement l'équation (2), on obtient :

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right)_{i+\frac{1}{2}} + 2 \cdot \frac{Q_{i+\frac{1}{2}}}{A_{i+\frac{1}{2}}} \cdot \left(\frac{\partial Q}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{Q_{i+\frac{1}{2}}^2}{A_{i+\frac{1}{2}}^2} \cdot \frac{A_{i+1} - A_i}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} = -g \cdot A_{i+\frac{1}{2}} \cdot \frac{Z_{i+1} - Z_i}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{C_f \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^2}{2 \cdot h_{i+\frac{1}{2}}} \cdot A_{i+\frac{1}{2}} \quad (9)$$

$$\text{Avec } C_f = \frac{2gh}{K_s^2 R_h^{4/3}}$$

Chacun des termes de l'équation (9) est explicité par la suite suivant les notations de l'équation (10) :

$$QM1 + QM2 + QM3 = QM4 + QM5 \quad (10)$$

$$QM1 = \frac{Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} \quad (11)$$

Comme les débits sont calculés aux faces de chaque maille, le terme $(\frac{\partial Q}{\partial x})_{i+\frac{1}{2}}$ est calculé par rapport à ses faces amont et aval, soit $i - \frac{1}{2}$, et $i + \frac{3}{2}$. QM2 s'écrit ainsi :

$$QM2 = 2 \cdot \frac{\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta)Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{A_{i+\frac{1}{2}}^n} \cdot \frac{Q_{i+\frac{3}{2}}^n - Q_{i-\frac{1}{2}}^n}{2 \cdot \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \quad (12)$$

$$QM2 = \alpha_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot \left(\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (13)$$

$$QM3 = - \frac{Q_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot (\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n)}{\frac{1}{4}(A_{i+1}^n + A_i^n)^2} \quad (14)$$

$$QM3 = b_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot (\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n) \quad (15)$$

$$QM4 = - \frac{g \cdot A_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \cdot (\theta \cdot (Z_{i+1}^{n+1} - Z_i^{n+1}) + (1 - \theta) \cdot (Z_{i+1}^n - Z_i^n)) \quad (16)$$

$$QM4 = c_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot (\theta \cdot (Z_{i+1}^{n+1} - Z_i^{n+1}) + (1 - \theta) \cdot (Z_{i+1}^n - Z_i^n)) \quad (17)$$

$$QM5 = - \frac{C_f \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{2 \cdot h_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot A_{i+\frac{1}{2}}^n} \cdot \left(\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (18)$$

$$QM5 = d_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot \left(\theta \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + (1 - \theta) \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \quad (19)$$

Avec,

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{Q_{i+\frac{3}{2}}^n - Q_{i-\frac{1}{2}}^n}{A_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot \Delta x_{i+\frac{1}{2}}}, b_{i+\frac{1}{2}}^n = - \frac{4 \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \cdot \frac{A_{i+1}^n - A_i^n}{(A_{i+1}^n + A_i^n)^2}, c_{i+\frac{1}{2}}^n = - \frac{g A_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}, d_{i+\frac{1}{2}}^n = - \frac{C_f \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n}{2 \cdot h_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot A_{i+\frac{1}{2}}^n}$$

On obtient la discrétisation finale :

$$Q_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \theta \cdot g_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot Z_{i+1}^{n+1} + \theta \cdot g_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot Z_i^{n+1} = f_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot Q_{i+\frac{1}{2}}^n + (1 - \theta) \cdot g_{i+\frac{1}{2}}^n \cdot (Z_{i+1}^n - Z_i^n) \quad (20)$$

Avec,

$$e_{i+\frac{1}{2}}^n = \alpha_{i+\frac{1}{2}}^n + b_{i+\frac{1}{2}}^n - d_{i+\frac{1}{2}}^n, f_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{1 - \Delta t \cdot (1 - \theta) \cdot e_{i+\frac{1}{2}}^n}{1 + \Delta t \cdot \theta \cdot e_{i+\frac{1}{2}}^n}, g_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{\Delta t \cdot e_{i+\frac{1}{2}}^n}{1 + \Delta t \cdot \theta \cdot e_{i+\frac{1}{2}}^n}$$

Les discrétisations (8) et (20) sont implémentées dans la librairie *libhyd*.

Les deux ensembles de variables cote et débit sont résolues simultanément dans un système qui comprend en premier lieu les cotes aux centres, puis les débits aux faces. Par conséquent pour un système de N éléments de calcul, les N premières lignes concernent les cotes au centre des éléments, et les N+p lignes suivantes concernent les débits aux faces. Le système comporte donc 2N+p lignes. p vaut 1 dans un système mono-axial. Par contre à chaque occurrence d'une branche p augmente de 1.

1.3. Loi de fonctionnement d'un ouvrage hydraulique

Le débit au droit d'un ouvrage hydraulique est calculé comme la somme des débits vérifiant les lois de fonctionnement des différents constituants de l'ouvrage. Il s'agit d'une relation de face qui est utilisée pour représenter l'équation de débit dans le système linéaire à 2N+P équations mentionnées ci-dessus.

Les formules décrivant le fonctionnement des seuils et des sousverses au niveau d'une vanne noyée sont issues de Even (1995), et Degoutte (Degoutte, 2002). Elles sont rappelées ci-après.

1.3.1. Loi de déversement d'un seuil

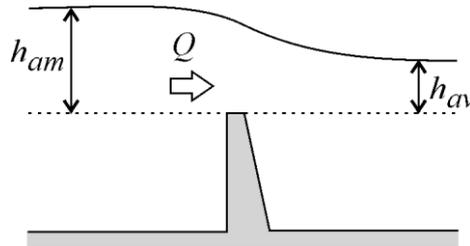


Figure 3. Seuil

Si $h_{am} \geq 1.5h_{av}$, alors le seuil est dénoyé. L'écoulement aval n'a alors pas d'influence sur l'écoulement au droit du seuil. La loi de seuil s'écrit :

$$Q = \frac{2}{3} \mu_d \cdot l \cdot \sqrt{2g} \cdot h_{am}^{1.5} \quad (21)$$

La discrétisation suit une formulation explicite :

$$Q^n - \frac{2}{3} \mu_d \cdot l \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h_{am}^{n-1}} \cdot Z_{am}^n = -\frac{2}{3} \mu_d \cdot l \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h_{am}^{n-1}} \cdot h_s^n \quad (22)$$

Avec,

Q : le débit, [$m^3 \cdot s^{-1}$]

μ_d : le coefficient du débit du seuil, 0.6, [-]

l : la largeur du seuil, [m]

h_{am} : la hauteur d'eau par rapport à la hauteur du seuil, $h_{am} = Z_{am} - h_s$, [m]

h_s : la hauteur du seuil, [m]

Z_{am} : la cote d'eau en amont du barrage, [m]

Si $h_{am} < 1.5h_{av}$, le seuil est noyé. Le tirant d'eau aval influence l'écoulement au droit du seuil. La loi devient :

$$Q = \sqrt{3} \cdot \mu_d \cdot l \cdot h_{av} \sqrt{2 \cdot g \cdot (h_{am} - h_{av})} \quad (23)$$

Afin de discrétiser linéairement l'équation (23), on la réécrit comme,

$$Q = \sqrt{3} \cdot \mu_d \cdot l \cdot h_{av} \cdot \sqrt{2 \cdot g} \frac{Z_{am} - Z_{av}}{\sqrt{(h_{am} - h_{av})}} \quad (24)$$

Dont la forme de discrétisation explicite est la suivante :

$$Q^n - \sqrt{3} \cdot \mu_d \cdot l \cdot h_{av}^{n-1} \cdot \sqrt{2g} \frac{Z_{am}^n}{\sqrt{(h_{am}^{n-1} - h_{av}^{n-1})}} + \sqrt{3} \cdot \mu_d \cdot l \cdot h_{av}^{n-1} \cdot \sqrt{2g} \frac{Z_{av}^n}{\sqrt{(h_{am}^{n-1} - h_{av}^{n-1})}} = 0 \quad (25)$$

1.3.2. Loi de sousverses d’une vanne

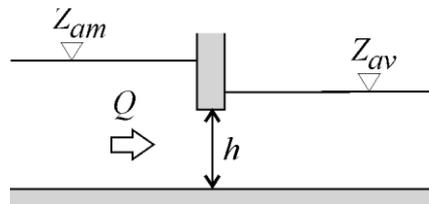


Figure 4. Vanne noyée

Toutes les vannes sont considérées comme noyées. Le débit au droit de la vanne s’exprime comme suit :

$$Q = \mu_d \cdot l \cdot h_v \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot (Z_{am} - Z_{av})} \quad (26)$$

Avec,

μ_d : le coefficient du débit, 0.6, [-]

h_v : la hauteur de la vanne, [m]

La discrétisation est suivante :

$$Q^n - \mu_d \cdot l \cdot h_v^n \cdot \sqrt{2g} \cdot \frac{Z_{am}^n}{\sqrt{Z_{am}^{n-1} - Z_{av}^{n-1}}} + \mu_d \cdot l \cdot h_v^n \cdot \sqrt{2g} \cdot \frac{Z_{av}^n}{\sqrt{Z_{am}^{n-1} - Z_{av}^{n-1}}} = 0 \quad (27)$$

2. Librairie de transport *libttc*

Cette librairie est utilisée après le calcul hydraulique afin de simuler l’advection et la dispersion des substances. L’équation de transport utilisée est issue de de Marsily (1981).

$$\omega \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D \cdot \overrightarrow{\text{grad}}C - C\vec{U}) \quad (28)$$

Avec,

ω : la porosité du milieu, ici $\omega = 1$ pour la rivière, [-]

C : la concentration volumique de chaque substance, [mmol.m⁻³]

D : le coefficient de dispersion, [m².s⁻¹]

\vec{U} : la vitesse de Darcy, ici la vitesse de l’eau, [m.s⁻¹]

On peut exprimer l’équation (2121) en débit pour une dimension,

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(QC)}{\partial x} = AD \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + F_x \quad (29)$$

Avec,

A : la surface mouillée au centre de la maille, [m²]

Q : les débits aux faces de la maille, [m³.s⁻¹]

F_x : le flux d’apport ou le flux de prélèvement longitudinal, [mmol.m⁻¹.s⁻¹]

2.1. Discrétisation numérique

La discrétisation se fait en temps et en espace.

$$\begin{aligned} & \frac{A_i^n C_i^n - A_i^{n-1} C_i^{n-1}}{\Delta t} + \theta \frac{Q_i^n C_i^n - Q_{i-1}^n C_{i-1}^n}{\Delta x} + (1 - \theta) \frac{Q_i^{n-1} C_i^{n-1} - Q_{i-1}^{n-1} C_{i-1}^{n-1}}{\Delta x} \\ & = D \left(A_i^n \theta \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2} + A_i^{n-1} (1 - \theta) \frac{C_{i+1}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-1}^{n-1}}{\Delta x^2} \right) + \theta F_x^n \\ & + (1 - \theta) F_x^{n-1} \end{aligned} \quad (30)$$

2.2. La réoxygénation aux barrages

Cette partie s'inspire de la thèse de Even, (1995). Ce rapport ne présente que la discrétisation numérique. L'équation (30) sous forme implicite pour l'advection pure est la suivante pour un barrage situé à la face $i - \frac{1}{2}$:

$$\frac{A_i^n C_i^n - A_i^{n-1} C_i^{n-1}}{\Delta t} + \frac{Q_i^n C_i^n - Q_{i-1}^n C_{i-1}^n}{\Delta x} = F_x^n \quad (31)$$

Avec,

i : la maille aval du barrage

$i - 1$: la maille amont du barrage

Il est possible d'exprimer le terme $Q_{i-1}^n C_{i-1}^n$ en prenant en compte la réaération par $Q_{i-1}^n (C_{i-1}^n + \delta^n)$. Le terme source δ^n correspond à la partie de réoxygénation. L'oxygénation est généralement exprimée à l'aide d'un paramètre exprimant le rapport des déficits en oxygène amont et aval,

$$r = \frac{[O_2]^{sat}(T) - [O_2]_{am}}{[O_2]^{sat}(T) - [O_2]_{av}} \quad (32)$$

En exprimant $[O_2]_{av}$ par $C_{i-1}^n + \delta^n$, on trouve :

$$\delta^n = \frac{r - 1}{r} ([O_2]^{sat}(T) - C_{i-1}^n) \quad (33)$$

Une distinction est faite en écoulement noyé et dénoyé. La formule de Holler donne la valeur théorique en écoulement dénoyé (Even, 1995) :

$$r_d = 1 + 0.21H \quad (34)$$

Pour un écoulement noyé, on utilise la formule d'Avery et Novack (Even, 1995).

$$r_n = 1 + A Fr_{av}^{0.21} Re^{0.75} \quad (35)$$

Avec,

A : 1.0043E-06

Fr : le nombre de Froude, $Fr = \frac{u^2}{gL_c}$, [-]

u : la vitesse de l'eau [m.s⁻¹]

L_c : la longueur caractéristique [m]

Re : le nombre de Reynolds, $Re = \frac{uL}{\nu}$, [-]

L : la dimension caractéristique [m]

ν : la viscosité cinématique de l'eau [m².s⁻¹]

Il faut distinguer les parts du débit noyées (Q_{i-1}^{nns}) et dénoyées (Q_{i-1}^{nds}) en surverse:

$$Q_{i-1}^n = Q_{i-1}^{nds} + Q_{i-1}^{nns} + Q_{i-1}^{nsous} \quad (36)$$

Avec,

Q_{i-1}^{nsous} : le débit en sousverse, [$m^3 \cdot s^{-1}$]

Le terme $Q_{i-1}^n C_{i-1}^n$ en tenant compte de la réaération devient :

$$(Q_{i-1}^{nds} + Q_{i-1}^{nns})(C_{i-1}^n + \delta^n) + Q_{i-1}^{nsous} C_{i-1}^n = Q_{i-1}^n C_{i-1}^n + Q_{i-1}^{nds} \delta^{nds} + Q_{i-1}^{nns} \delta^{nns} \quad (37)$$

En intégrant l'équation (37) dans l'équation (31), on trouve :

$$\frac{A_i^n C_i^n - A_i^n C_i^{n-1}}{\Delta t} + \frac{Q_i^n C_i^n - Q_{i-1}^n C_{i-1}^n - Q_{i-1}^{nds} \delta^{nds} - Q_{i-1}^{nns} \delta^{nns}}{\Delta x} = F_x^n \quad (38)$$

L'équation (38) devient ainsi :

$$\frac{A_i^n C_i^n - A_i^n C_i^{n-1}}{\Delta t} + \frac{Q_i^n C_i^n - Q_{i-1}^n C_{i-1}^n + Q_{i-1}^{ns} \cdot coef C_{i-1}^n}{\Delta x} = F_x^n + \frac{Q_{i-1}^{ns} \cdot coef \cdot [O_2]^{sat}(T)}{\Delta x} \quad (39)$$

Avec,

Q_{i-1}^{ns} : le débit en surverse estimé à partir des lois de déversement aux barrages (Section 1.3.1), [$m^3 \cdot s^{-1}$]

$coef = frac_{debit} \cdot \frac{r_d - 1}{r_d} + (1 - frac_{debit}) \cdot \frac{r_n - 1}{r_n}$, [-]

$frac_{debit}$: la fraction du débit dénoyé en surverse, [-]

2.3. Parallélisation de l'équation de transport

Dans ProSe-P, les résolutions de l'équation de transport de chaque substance sont indépendantes les unes des autres. Supposons que l'on modélise le devenir de n espèces. Il est possible de distribuer ces résolutions sur N processeurs, chaque processeur traite alors $\frac{n}{N}$ espèces, soit un temps de calcul potentiellement réduit d'un facteur N pour la résolution du problème de transport (Fig.5).

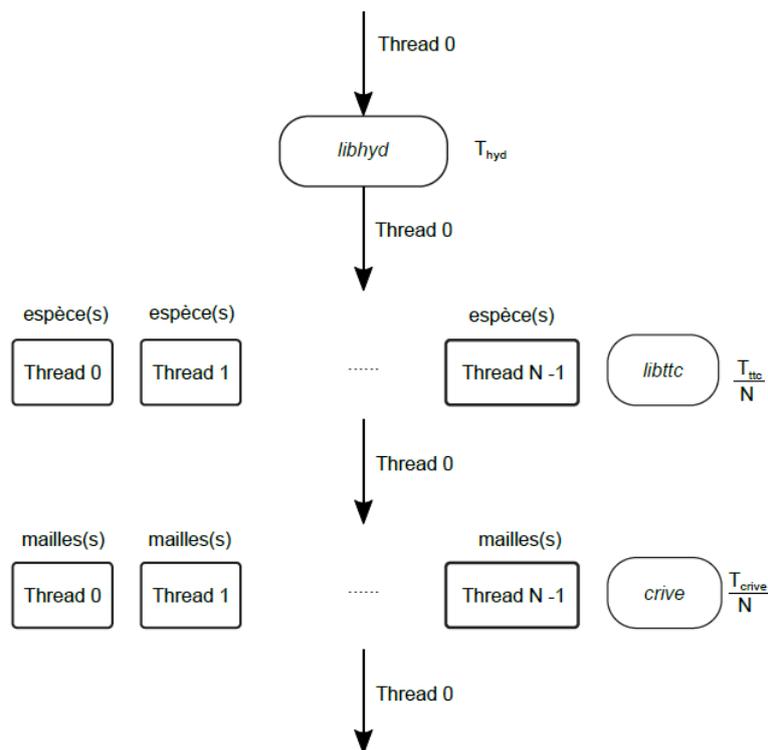


Figure 5. Schéma synthétique de calcul en parallèle dans ProSe-P (T_{hyd} : le temps de calcul pour hydraulique ; T_{ttc} : le temps de calcul pour le transport sans parallélisation ; T_{crive} : le temps de calcul pour la biogéochimie sans parallélisation. N : le nombre de processeurs; Thread 0 : le processeur principal).

3. Librairie biogéochimique *librive*

La librairie *librive* est la version en librairie de C-RIVE (Vilmin, 2012). C-RIVE est programmé en langage C, basé sur le modèle RIVE qui a été implémenté dans plusieurs codes numériques, notamment RIVERSTHRLER (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995) et ProSe (Even, 1995; Even et al., 1998; Flipo et al., 2004; Flipo et al., 2007b; Vilmin et al., 2015b; Vilmin et al., 2016b). C-RIVE simule les processus biogéochimiques dans le système rivière (Fig. 6), plus particulièrement les cycles du carbone, de l'azote, du phosphore et de l'oxygène. L'échange de dioxygène à l'interface eau-air et les diffusions turbulentes entre eau-sédiment sont également intégrés dans la librairie. Le processus de sédimentation-érosion des substances particulières est aussi implémenté dans le code. Le calcul se fait par un schéma explicite ou un schéma de Runge-Kutta de l'ordre 4 (par défaut).

Cette librairie est appelée après le calcul du transport. Puisque le calcul biogéochimique se fait au sein d'une maille, il est possible de programmer un calcul en parallèle par maille (Fig. 5). Chaque processeur traite $\frac{n}{N}$ mailles (n : le nombre de mailles, N : le nombre de processeurs utilisé).

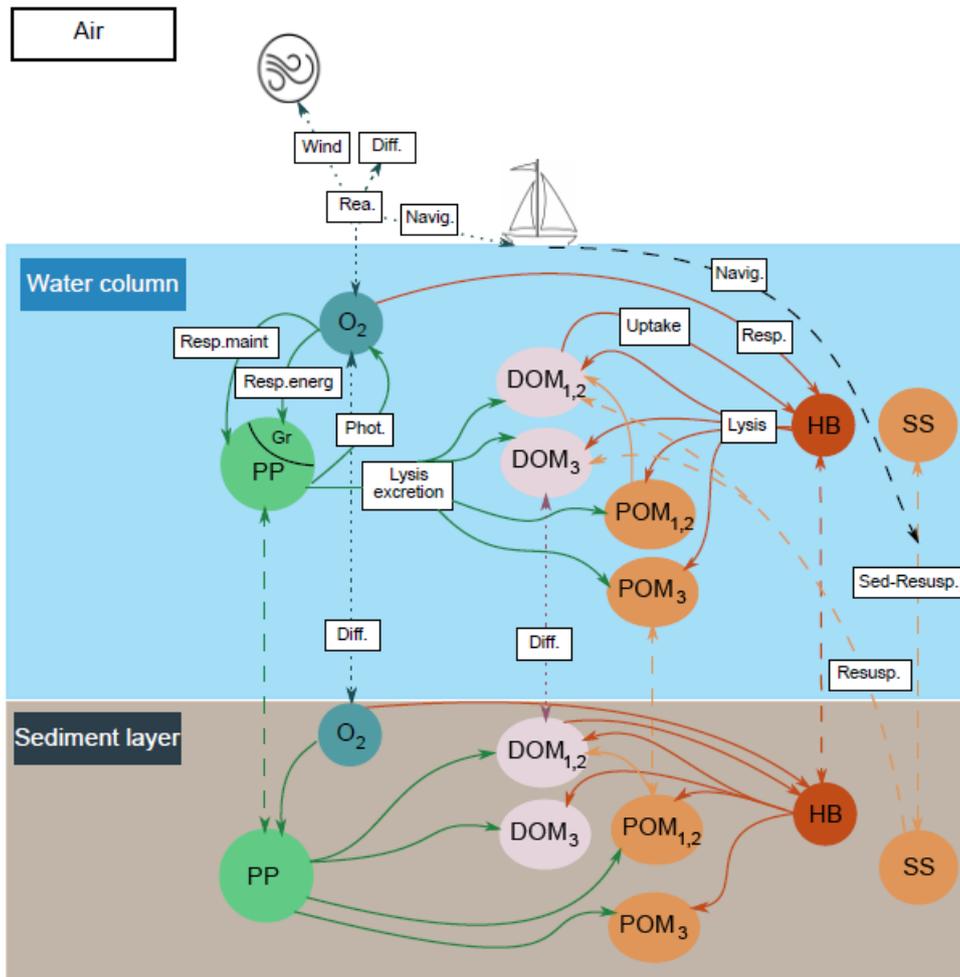


Figure 6. Schéma synthétique de C-RIVE (Wang et al., 2018), modifié à partir de (Vilmin et al., 2016a)

4. Performances de ProSe-P

Tout d’abord nous nous intéressons aux performances du code parallélisé ProSe-P. Si on renomme T_{hyd} (Fig. 5) en T_{np} pour désigner le temps de calcul de la partie non parallélisée (la lecture des données, le calcul hydraulique, le calcul des coefficients matriciels pour le transport, les passages des données entre les bibliothèques, l’impression des sorties etc.), le gain théorique se calcule par :

$$gain = \frac{T_{tot,np}}{T_{tot,p}} = \frac{N_{proc}}{1 + (N_{proc} - 1)T'_{np}} \quad (40)$$

Avec,

$T_{tot,np}$: le temps de calcul avec un processeur

$T_{tot,p}$: le temps de calcul avec N_{proc} processeurs

N_{proc} : le nombre de processeurs utilisé

T'_{np} : la proportion du temps de calcul pour la partie non parallélisée T_{np} , $T'_{np} = \frac{T_{np}}{T_{tot,np}}$

D’après la simulation réalisée avec un processeur, T'_{np} vaut 0.08, soit 8% du $T_{tot,np}$. En théorie, pour 10 processeurs, un gain de 5.8 est attendu (Fig. 7). Pourtant, le gain réel est seulement de 4.7, ce qui correspondrait au gain de 7 processeurs. L’accès au disque dur (physique) par d’autres utilisateurs pourrait être une explication à cet écart entre gain réel et gain théorique.

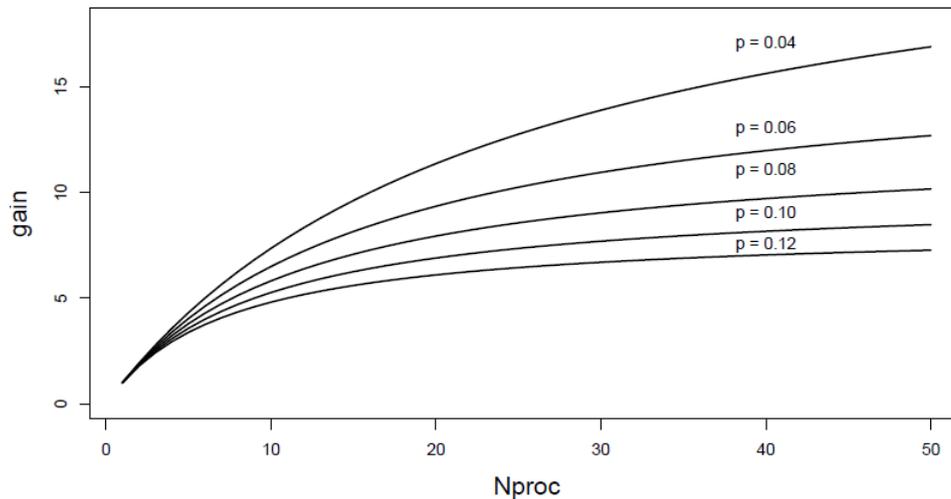


Figure 7. Performance théorique de la parallélisation, p : la proportion du temps de calcul pour la partie non parallélisée

Tableau 1. Performance de calcul en parallèle pour ProSe-P

| Code | N_{maille} | N_{proc} | $dt(min)$ | $T(min)$ | gain |
|---------|--------------|------------|-----------|----------|------|
| ProSe-P | 959 | 10 | 10 | 23 | 4.7 |
| ProSe-P | 959 | 1 | 10 | 108 | - |

Il est alors intéressant de comparer les performances de ProSe-P avec celles de la version séquentielle de ProSe, validée en fin de phase VI du PIREN Seine, soit la version 3.6.9 (Vilmin, 2014; Laborie et al., 2016).

Le gain de ProSe-P avec 10 processeurs est de l’ordre 2 (Tab. **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**) par rapport à ProSe3.6.9. Il est un peu loin de nos attentes théoriques (4.7). Puisque ProSe-P avec un processeur est deux fois plus lent que ProSe3.6.9. Son optimisation fera l’objet de travaux futurs.

Tableau 2. Performance de calcul de ProSe-P et ProSe3.6.9

| Code | N_{maille} | N_{proc} | $dt(min)$ | $T(min)$ | gain |
|------------|--------------|------------|-----------|----------|------|
| ProSe-P | 959 | 10 | 10 | 23 | 2.1 |
| ProSe3.6.9 | 958 | 1 | 10 | 49 | - |

5. Validation de ProSe-P sur le calcul hydraulique

5.1. Cas test de barrage

Un cas test de barrage avec deux biefs a été construit pour comparer les résultats de ProSe-P en régime permanent avec ceux de HEC-RAS5.0.3 et de ProSe3.6.9.

Les deux biefs mesurent 40 km avec une section rectangulaire de largeur de 10 m. La pente du fond est 0.001 au sein des biefs. Un seuil de largeur de 10 m avec un coefficient de débit (Eq. (21)) de 0.4 se positionne au milieu du domaine. Le coefficient de Strickler est 20 pour les deux biefs. Le débit imposé en amont du domaine est $29.82 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ qui donne une hauteur d’eau théorique de 3 m. La charge imposée en aval est la hauteur théorique (3 m), ce qui implique que la surface libre sans barrage est parallèle à la cote du fond.

Selon les résultats obtenus (Fig. 8), ProSe-P et ProSe3.6.9 aboutissent à des résultats très proches, qui correspondent également à ceux de HEC-RAS5.0.3. Néanmoins, il existe une différence ténue entre ProSe-P et ProSe3.6.9 à l’aval des biefs, où ProSe-P affiche des performances plus proches de celles d’HEC-RAS. Le travail de parallélisation du code a ainsi permis de légèrement améliorer les performances globales du code.

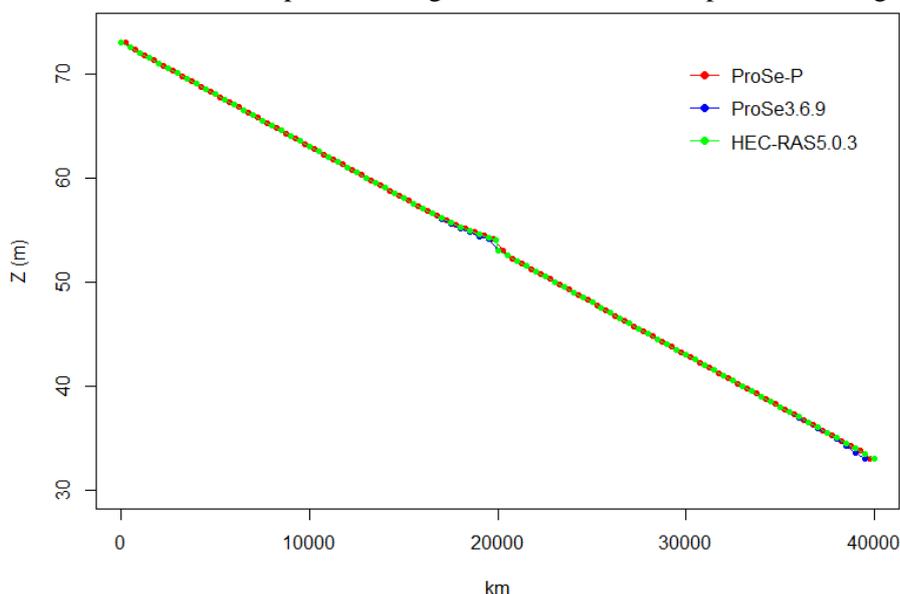


Figure 8. Comparaison d’un cas test de barrage en régime permanent

5.2. Une simulation de modèle Seine

Le modèle représente les 220 km de Seine et Marne depuis l’amont de l’agglomération parisienne (Choisy et Neuilly) jusqu’à l’estuaire de la Seine (Poses) soumis à de forts rejets anthropiques. Il s’agit du domaine simulé à l’échelle pluriannuelle par Vilmin (2014). Le domaine est découpé en 959 mailles pour ProSe-P et 958 mailles pour ProSe3.6.9. La période simulée est l’année de 2007 (365 jours). On compare les résultats simulés par ProSe-P et ProSe3.6.9 à 8 stations.

Les débits sont bien simulés par ProSe-P (Fig. 9 & 10). Le bilan de masse est bien conservé sur l’ensemble du domaine simulé. Mais les débits simulés par ProSe3.6.9 présentent des instabilités à chaque démarrage

d'un nouveau pas de temps (Fig. 10 & 11). Prose-P est ainsi plus stable, ce qui indique de meilleures performances pour la résolution du problème hydraulique.

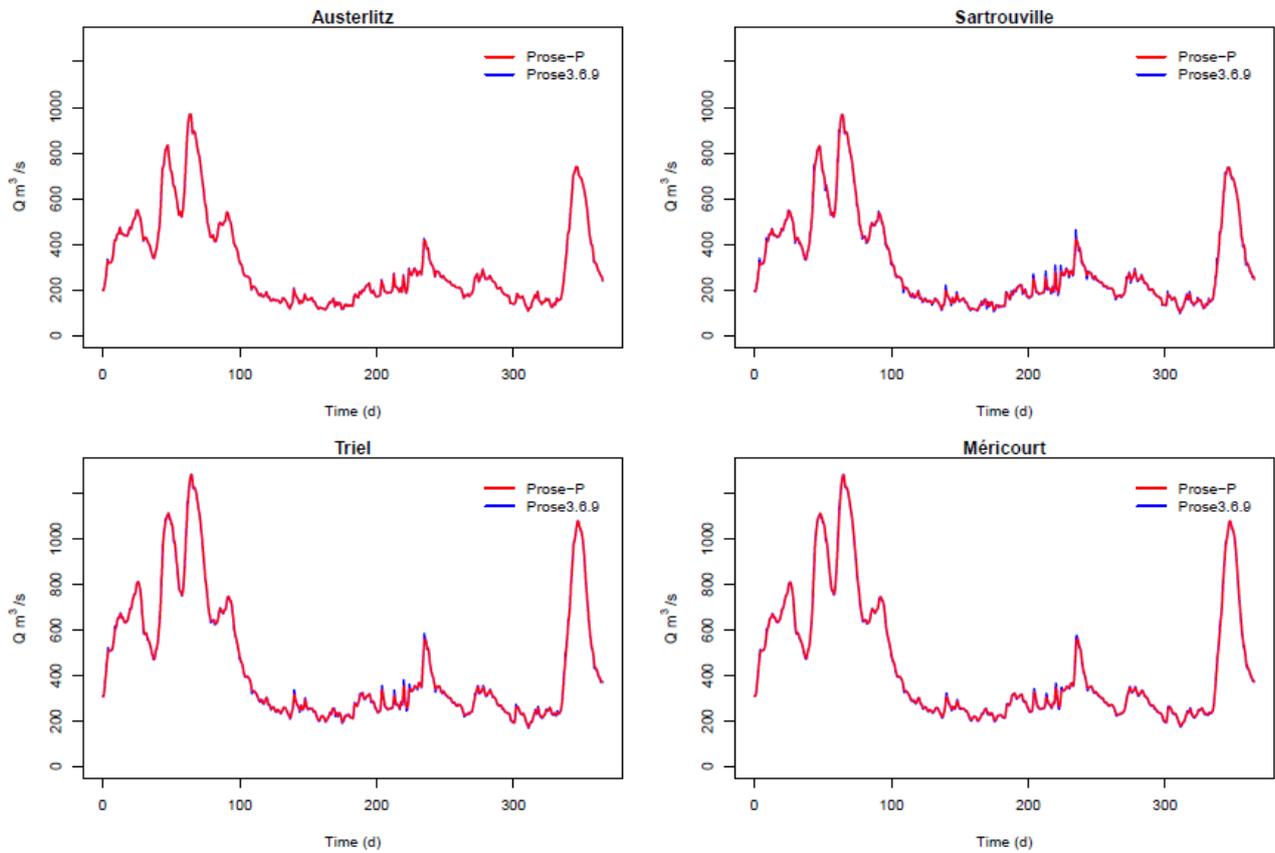


Figure 9. Les débits simulés par ProSe-P et ProSe3.6.9 pour l'année 2007

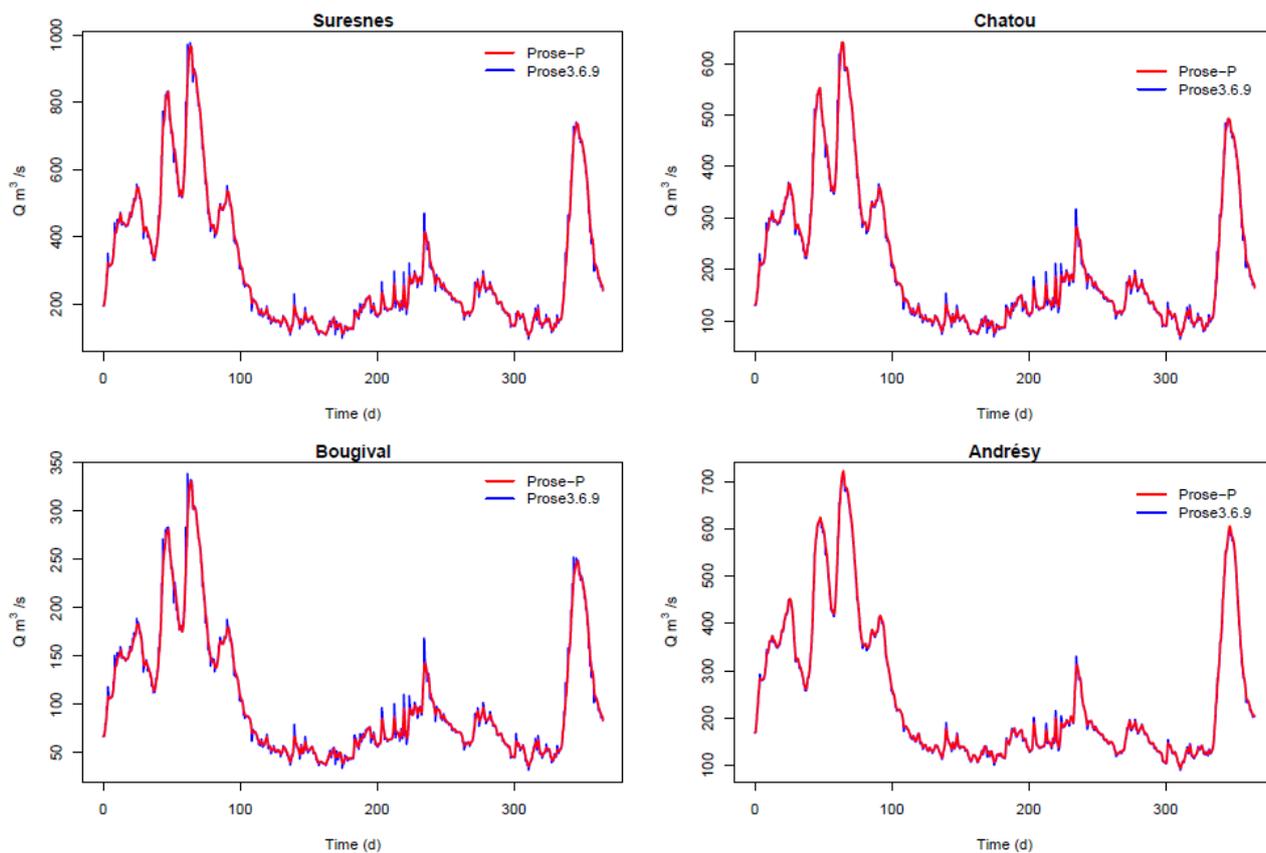


Figure 10. Les débits simulés par ProSe-P et ProSe3.6.9 pour l’année 2007

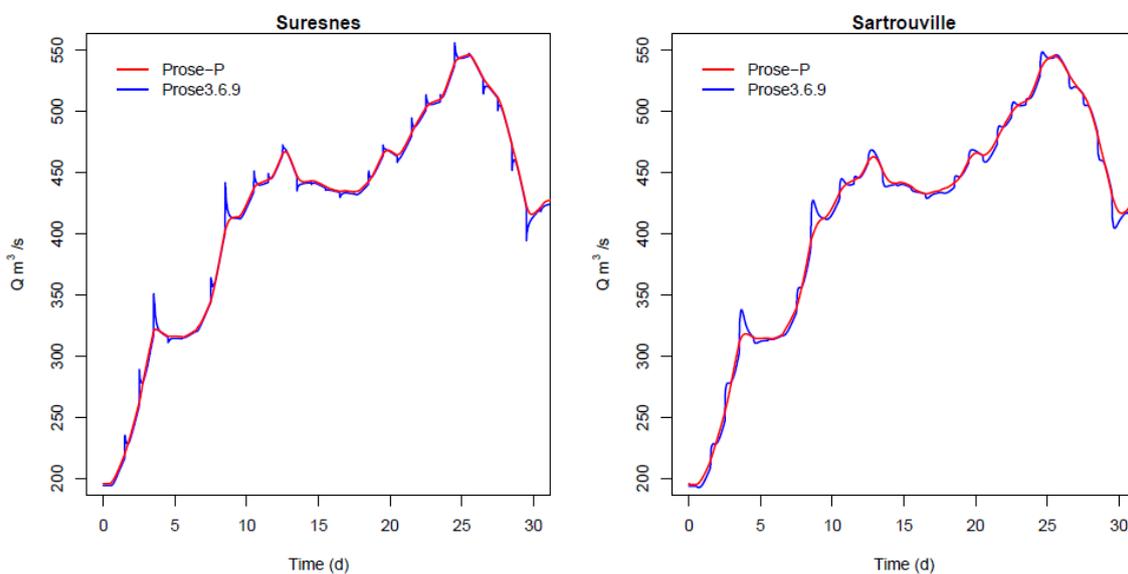


Figure 11. Le débit simulé les 30 premiers jours de l’année 2007 à Suresnes et Sartrouville

6. Validation de ProSe-P sur le calcul biogéochimique (O₂)

Les tendances des concentrations de l’oxygène dissous simulées par les deux codes sont cohérentes (Fig. 12 & 13). Il existe cependant un léger écart en étiage entre les deux codes. Les différences sont liées à la reformulation de la réaération aux barrages qui considère un rôle passif des vannes, et à la prise en compte de la température dans le calcul des échanges air-eau (Wilke & Chang, 1955), ce qui n’était pas le cas dans ProSe3.6.9.

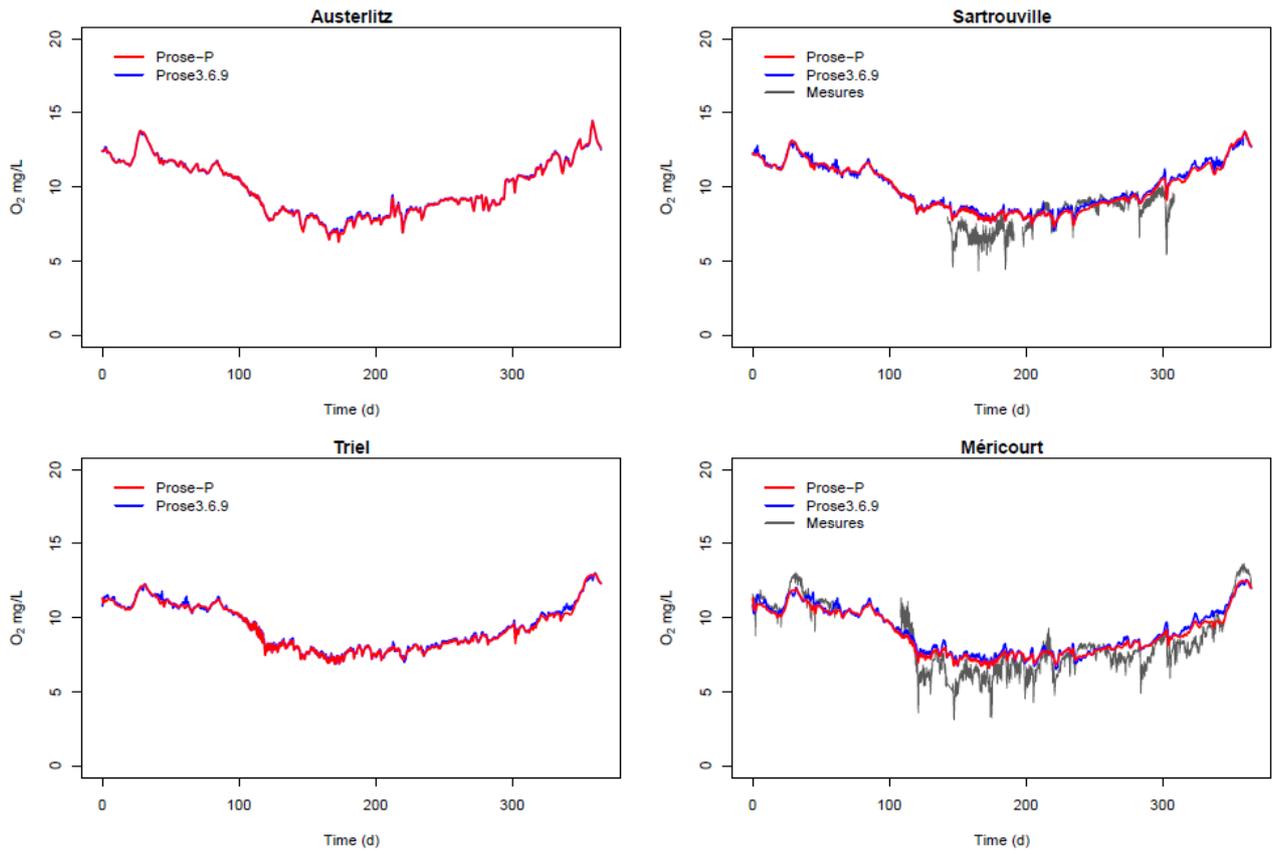


Figure 12. Les concentrations de l'oxygène dissous simulées par ProSe-P et ProSe3.6.9

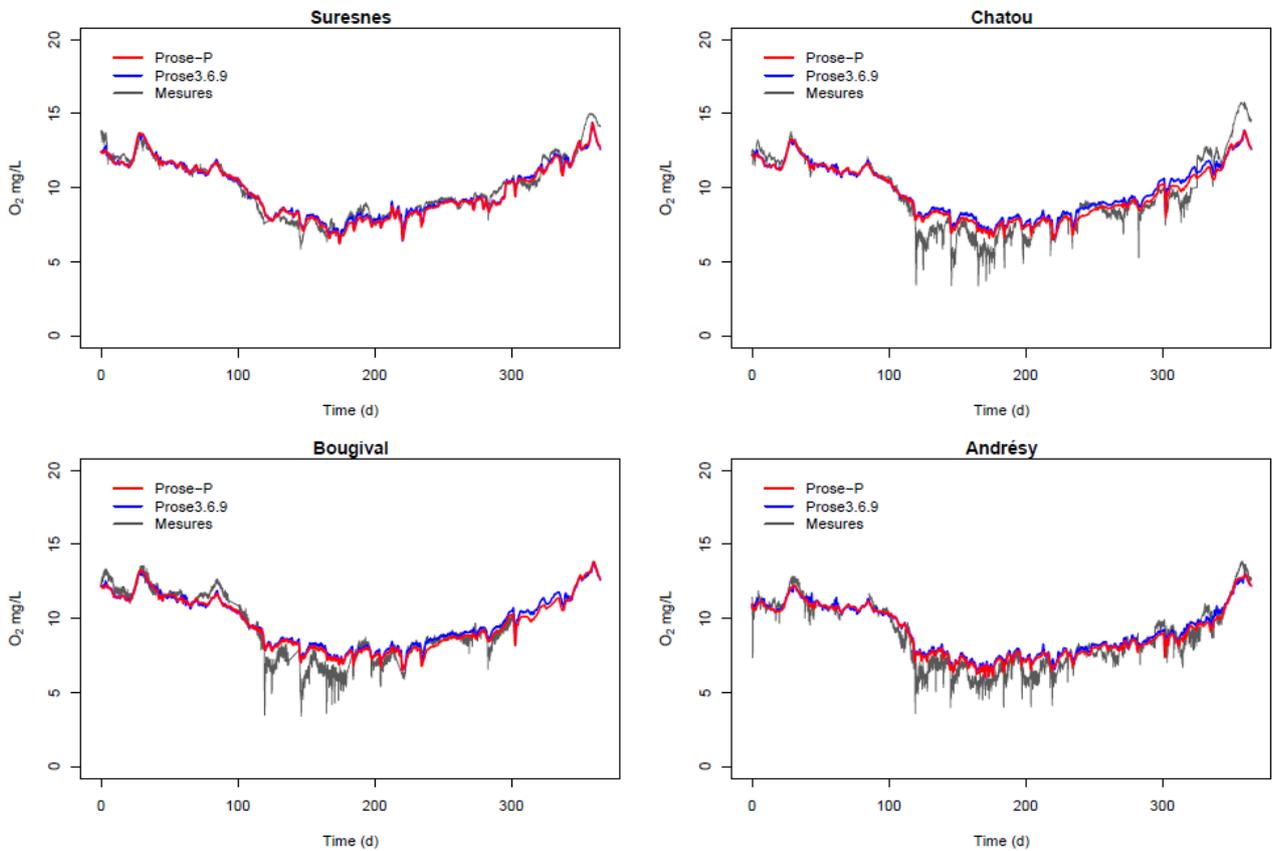


Figure 13. Les concentrations de l'oxygène dissous simulées par ProSe-P et ProSe3.6.9

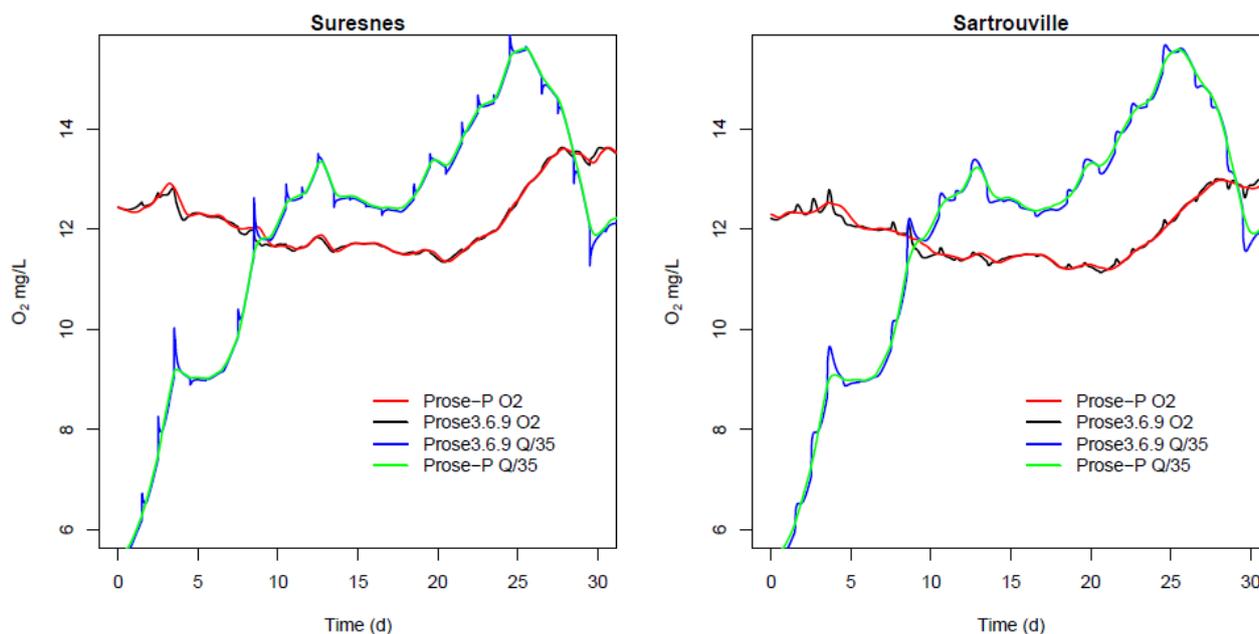


Figure 14. Les concentrations de l'oxygène dissous simulées des premiers 30 jours à Suresnes et Sartrouville

ProSe3.6.9 a tendance à surestimer les concentrations en O_2 en période de basses eaux (Vilmin, 2014). Ces écarts sont légèrement atténués avec ProSe-P pour les raisons indiquées précédemment (Fig. 15), mais les concentrations en oxygène restent sur-estimées à l'étiage, et l'amplitude des variations nyctémérales des concentrations en O_2 sous-estimées.

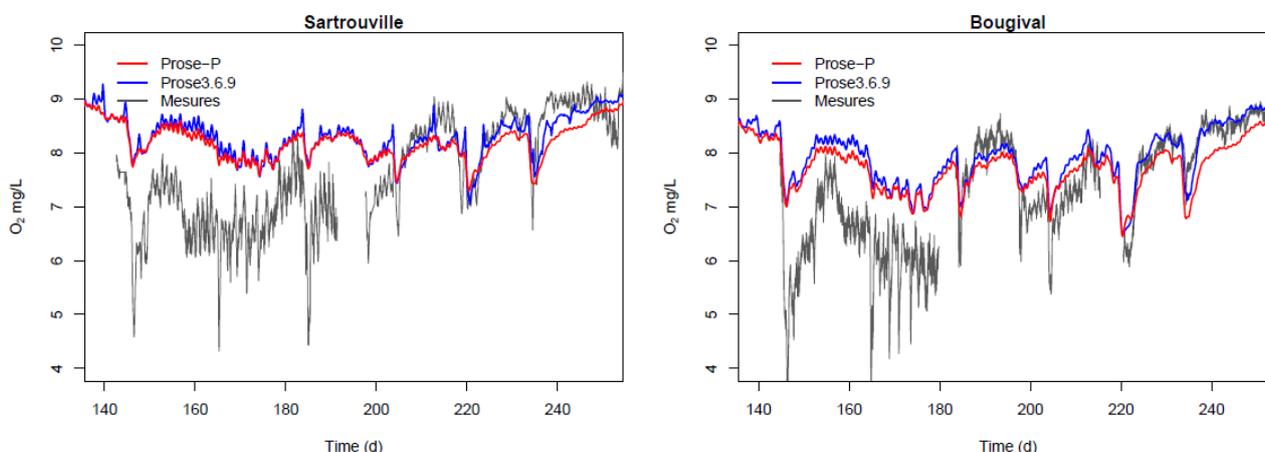


Figure 15. Les concentrations de l'oxygène dissous simulées des premiers pendant l'étiage à Sartrouville et Bougival

7. Conclusions

En conclusion, une nouvelle version parallélisée du code ProSe a été construite en se basant sur trois bibliothèques C : libhyd, libttc, et librive. Cette nouvelle version, appelée ProSe-P, est maintenant opérationnelle et affiche des performances améliorées par rapport à l'ancienne version séquentielle du code, ProSe3.6.9. L'amélioration des performances comprend, une réduction des temps de calcul se basant sur la parallélisation qui permet d'exploiter les nouvelles capacités des machines multi-processeurs, une plus grande robustesse du code hydraulique, et une meilleure représentation des échanges eau-air intégrant l'influence de la température. Il s'agit d'une étape importante dans le développement du code ouvrant la porte à un pan nouveau de recherche autour de l'intégration des données de suivi haute fréquence dans la caractérisation de l'état de la Seine. Ce travail se poursuivra l'an prochain par la mise en place de la version du code ProSe-PA

permettant d'assimiler les données de suivi de l'oxygène dissous (Vilmin, 2014). Ce travail s'appuiera notamment sur l'analyse de sensibilité de C-RIVE réalisée l'an passé (Wang et al., 2017, 2018).

Bibliographie

Billen, G., Garnier, J. & Hanset, P. (1994). Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : The riverstrahler model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia*, 289, pp. 119–137.
de Marsily, G., 1981. *Hydrogéologie quantitative*. Masson.

Degoutte, G., (2002). *HYDRAULIQUE ET DYNAMIQUE FLUVIALE appliquées au diagnostic, à l'aménagement et la gestion des rivières*. ENGREF ed.

Even, S. (1995). *Modélisation d'un écosystème fluvial : la Seine - Le modèle ProSe*. PH. D. thesis. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

Even, S. et al. (1998). River ecosystem modelling : Application of the ProSe model to the Seine river (France). *Hydrobiologia*, 373, pp.27-37.

Flipo, N. et al. (2004). Biogeochemical modelling at the river scale : Plankton and periphyton dynamics - Grand Morin case study, France. *Ecol. Model.*, 176, pp.333-47.

Flipo, N. et al. (2007b). Primary production in headwater streams of the Seine basin : the Grand Morin case study. *Sciences of Total Environment*, 375, pp.98–109.

Garnier, J., Billen, J. & Coste, M. (1995). Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine : Observations and modelling. *Limnol. Oceanogr.*, 40(4), pp.750-65.

Laborie, B. et al. (2016). Le modèle de prédiction de la qualité de la Seine ProSe - Améliorations apportées par les récents travaux de recherche (Piren-Phase VI). *Techniques Sciences Méthodes*, (11), pp.43-66.

Vilmin, L. (2012). *Le modèle de simulation biogéochimique C-RIVE*. Technical report. PIREN-Seine.

Vilmin, L. (2012). *Module hydrodynamique HyCu*. Notice HyCu. Mines ParisTech.

Vilmin, L. (2014). *Modélisation du fonctionnement biogéochimique de la Seine de l'agglomération parisienne à l'estuaire à différentes échelles temporelles*. PH. D. thesis. Mines ParisTech.

Vilmin, L. (2014). *Modélisation du fonctionnement biogéochimique de la Seine de l'agglomération parisienne à l'estuaire à différentes échelles temporelles*. Thèse de doctorat. Mines ParisTech.

Vilmin, L. et al. (2015b). Impact of hydro-sedimentary processes on the dynamics of soluble reactive phosphorus in the Seine River. *Biogeochemistry*, 122, pp.229–51.

Vilmin, L., Flipo, N., Escoffier, N. & Groleau, A. (2016b). Estimation of the water quality of a large urbanized river as defined by the european wfd : what is the optimal sampling frequency ? *Environmental Science and Pollution Research*.

Vilmin, L. et al. (2016a). Carbon fate in a large temperate human-impacted river system : Focus on benthic dynamics. *in a large temperate human-impacted river system : Focus on benthic dynamics*, 30(7), pp.1086 - 1104.

Wang, S., Flipo, N. & Romary, T. (2017). *Etude de sensibilité du modèle biogéochimique C-RIVE en vue du développement d'une méthodologie d'assimilation de données*. PIREN Seine.

Wang, S., Flipo, N. & Romary, T. (2018). Time-dependent global sensitivity analysis of the C-RIVE biogeochemical model in contrasted hydrological and trophic contexts. *Water Research*, 144, pp.341 - 355.

Wilke, C.R. & Chang, P. (1955). Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *AIChE Journal*, 1(2), pp.264-70.