

Comparaison entre méthodes de simulation de fluides

Michel Jean Joseph Donnet

2024-06-26

Table des matières

1	Introduction	3
2	Mécanique des fluides	4
2.1	Variables	4
2.2	Équations d'Euler	4
2.2.1	Équation de continuité	5
2.2.2	Équation de la quantité de mouvement	5
2.2.3	Équation de l'énergie	5
2.3	Équations de Navier-Stokes	5
2.3.1	Équation de continuité	6
2.3.2	Équation de la quantité de mouvement	6
2.3.3	Équation de l'énergie	6
2.4	Équation de Boltzmann	6
2.4.1	Collisions négligées	6
2.4.2	Collisions non négligées	7
3	Méthode SPH	8
3.1	Histoire	8
3.2	Interpolation	8
3.3	Principes de base	9
4	Méthode LBM	11
4.1	Histoire	11
4.1.1	Principes de base	11
4.2	Représentation et fonction de distribution	11
4.2.1	Moments de la fonction de distribution	12
4.3	Évolution de la fonction de distribution en fonction du temps	13
4.3.1	Opérateur de collision Ω	13
4.4	Computation de la méthode LBM	14
4.4.1	Distribution d'équilibre f^{eq}	14
4.4.2	Discrétisation	14
4.4.3	Lattice Boltzmann Equation (LBE)	15
4.4.4	Viscosité	15
4.4.5	Algorithme	15
5	La containerisation	17
5.1	Notions générales	17
5.2	Pourquoi utiliser la containerisation ?	18
5.3	Affichage X11	18
5.4	Affichage d'un container sur ordinateur	19
5.5	Affichage d'un container sur serveur distant	19
5.6	Limitations	20
6	LBM VS SPH	23
6.1	Introduction	23
6.2	Comparaison théorique	23



6.2.1	Approche utilisée	23
6.2.2	Maillage	23
6.2.3	Phénomènes physiques	24
6.3	Comparaison technologique	24
6.3.1	Performances	24
6.3.2	Technologies utilisées	25
7	Comparaison entre les résultats	28
7.1	Initialisation de la simulation	28
7.1.1	Moments clés	31
7.2	Exécution des codes	31
7.3	Interprétation des résultats	34
7.3.1	Utilisation du CPU et de la RAM	34
7.3.2	Utilisation du GPU	34
8	Conclusion	36
8.1	Résumé des comparaisons	36
8.2	Conclusion	37
8.3	Remerciements	38
8.4	Annexe	38

Chapitre 1

Introduction

La terre est appelée “La planète bleue”. En effet, près de 70% de la surface de la terre est recouverte d'eau, donnant ainsi une couleur bleue à la terre, comme les astronautes ont pu le constater lors de la mission Apollo en 1972. De plus, la terre possède l'eau dans tous ses états : solide, liquide et gazeux.

L'eau est quelque chose qui a beaucoup intéressé les scientifiques de toutes les époques. Nous pouvons notamment citer parmi eux le légendaire Archimète qui, au cours du 3ème siècle avant Jésus-Christ, aurait immersé une couronne dans l'eau pour déterminer la pureté de l'or dont elle était faite. La science a nommé cette méthode la poussée d'Archimète.

Au 17ème siècle, un mathématicien et physicien dénommé Galilée s'est penché sur les fluides et a découvert la viscosité : l'une des propriétés fondamentales des fluides.

Puis entre le 17ème et le 18ème siècle le célèbre Isaac Newton a développé d'avantage les travaux de Galilée. Nous lui devons la définition d'un fluide newtonien, c'est à dire d'un fluide dont la viscosité est indépendante de la contrainte mécanique s'exerçant sur celui-ci, donc un fluide ayant un comportement prévisible.

Grâce aux études d'Isaac Newton, Leonhard Euler d'origine bâloise établit au cours du 18ème siècle des équations 2.2 modélisant l'écoulement d'un fluide parfait adiabatique, donc d'un fluide pour lequel la viscosité et les effets de la chaleur ne sont pas pris en compte.

Mais cela ne satisfit pas tous les scientifiques. C'est pourquoi, au cours du 19ème siècle, frustrés par l'impossibilité de modéliser des fluides visqueux, le mathématicien Henri Navier et le physicien Georges Gabriel Stokes décidèrent d'ajouter la notion de viscosité aux équations d'Euler 2.2, étendant ainsi les équations sur les fluides newtoniens. Leur travail fut reconnu et utilisé sous le nom d'équations de Navier-Stokes 2.3. Jusqu'à aujourd'hui, personne n'a réussi à trouver une forme analytique aux équations de Navier-Stokes 2.3, c'est pourquoi elles font toujours partie des 7 problèmes du prix du millénaire.

Cependant, la technologie a fait de nombreux progrès surtout vers la fin du 20ème siècle avec l'apparition de l'ordinateur, ce qui permit aux scientifiques de tenter de résoudre les équations de Navier-Stokes 2.3 grâce à des approximations et des méthodes numériques. Plusieurs méthodes ont donc été créées, notamment la méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) et la méthode Lattice Boltzmann Method (LBM). Cependant, quelles sont les différences entre ces méthodes ? Y-a-t-il une méthode dont l'implémentation est plus rapide que l'autre ? Serait-il possible d'utiliser ces méthodes afin d'obtenir un rendu en temps réel de haute qualité ?

Nous allons commencer par expliquer la théorie de chacune de ces méthodes, puis nous allons nous pencher sur les différences les distinguant et sur les résultats concrets obtenus grâce au code de GVDB-Voxel et de FluidX3D.



Chapitre 2

Mécanique des fluides

Un fluide est composé de nombreuses particules, qui peuvent autant être des atomes que des ions ou encore des molécules, qui sont des atomes liés entre eux par des liaisons fortes ou covalentes. À la différence d'un solide, un fluide est complètement déformable.

Il existe différents types de fluides, notamment :

- les gaz : ce sont des fluides composés de particules isolées se déplaçant en toute liberté et pouvant entrer en collision.
- les liquides : ce sont des fluides composés de particules liées entre elles par des liaisons faibles, comme les liaisons hydrogène. Ces particules ne peuvent donc pas se mouvoir en toute liberté, et lorsqu'une particule bouge, elle exerce une influence sur les autres particules liées à elle.

2.1 Variables

Table 2.1: table des variables utilisées

Variable	Description	Unité
t	temps	s
ρ	Masse volumique du fluide	$kg \cdot m^{-3}$
\mathbf{v}	Vecteur vitesse du fluide	$m \cdot s^{-1}$
p	Pression du fluide	$N \cdot m^{-2}$
\mathbf{F}	Forces externes s'appliquant sur le fluide	N
E	Énergie totale par unité de masse	$J \cdot kg^{-1}$
e	Énergie interne par unité de masse	$J \cdot kg^{-1}$
Σ	Contrainte de viscosité du fluide	$N \cdot m^{-2}$
q	Flux de chaleur causé par conduction thermique	$J \cdot s^{-1} \cdot m^{-2}$
q_R	Flux de chaleur causé par rayonnement	$J \cdot s^{-1} \cdot m^{-2}$
m	Masse des particules	kg
f	Fonction de densité de probabilité	$m^{-3} \cdot s^{-1}$
\mathbf{x}	Position de la particule	m

Dans la table 2.1, $E = e + \frac{1}{2}\|\mathbf{v}\|^2$

2.2 Équations d'Euler

Les équations d'Euler sont un ensemble d'équations décrivant l'écoulement d'un fluide non visqueux. Il y a 3 équations d'Euler.



2.2.1 Équation de continuité

L'équation de continuité peut être définie comme dans l'équation 2.1.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

avec :

- $\frac{\partial}{\partial t} \rho$ nous donne la variation de la masse par unité de volume en fonction du temps.
- $\nabla(\rho \mathbf{v})$ est le flux de masse. Il nous indique comment la masse se déplace et se redistribue dans le volume.

Dans l'équation 2.1, nous pouvons voir que la variation de la masse doit être égale au flux de masse du fluide. Cela signifie que la masse du fluide suit le principe de conservation de la matière.

2.2.2 Équation de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement est définie dans l'équation 2.2.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \rho \cdot F \quad (2.2)$$

avec :

- $\rho \cdot F$ nous donne l'ensemble des forces externes s'appliquant par unité de volume.
- $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T)$ représente le changement de vitesse dû au mouvement du fluide.
- $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v})$ est la variation temporelle de la quantité de mouvement.

Dans l'équation 2.2, il y a d'une part la variation temporelle de la quantité de mouvement plus la répartition de la quantité de mouvement dans le fluide, et de l'autre part la force résultant des variations de la pression plus les autres forces externes. On peut donc reconnaître la 2ème loi de Newton disant que la quantité de mouvement est égale à la somme des forces.

2.2.3 Équation de l'énergie

Soit un liquide adiabatique, c'est à dire pour lequel la chaleur n'est pas prise en compte.

L'équation de l'énergie est alors donnée par l'équation 2.3.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) + \rho F \mathbf{v} \quad (2.3)$$

avec :

- $\frac{\partial}{\partial t} \rho E$ est la variation temporelle de l'énergie par unité de volume.
- $\nabla \cdot (\rho E \mathbf{v})$ nous donne le flux d'énergie à travers le fluide, donc comment l'énergie est transportée dans le fluide.
- $-\nabla \cdot (p \mathbf{v})$ est le travail de la pression sur le fluide.
- $\rho F \mathbf{v}$ est le travail des forces extérieures sur le fluide.

Dans l'équation 2.3, il y a d'une part la somme entre la variation et le flux d'énergie, et d'autre part la somme du travail des forces s'exerçant sur le fluide. Cela découle du principe de conservation d'énergie : la somme du travail des forces est égale à l'énergie du fluide.

2.3 Équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes sont basées sur les équations d'Euler 2.2. Elles y ajoutent la notion de viscosité, qui représente les forces de friction internes du fluide. Elles permettent donc de modéliser des fluides réels visqueux à la différence des équations d'Euler 2.2 qui modélisent des fluides parfaits.

Il y a également 3 équations de Navier-Stokes.



2.3.1 Équation de continuité

Celle-ci ne diffère pas de l'équation de continuité d'Euler 2.1. Ceci semble normal, car la masse du fluide, même dans un fluide visqueux, ne peut toujours pas être créée ni détruite, et suit toujours le principe de conservation de la matière.

2.3.2 Équation de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement de Navier-Stokes 2.4 est basée sur l'équation d'Euler 2.2.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \nabla \Sigma + \rho \cdot F \quad (2.4)$$

- $\nabla \Sigma$ est la force exercée par la viscosité du fluide.

Dans l'équation 2.4, la force exercée par la viscosité a été ajoutée à la somme des forces de l'équation 2.2 d'Euler. Ainsi, l'équation 2.4 suit toujours la 2ème loi de Newton.

2.3.3 Équation de l'énergie

L'équation de l'énergie de Navier-Stokes 2.5 est basée sur l'équation de l'énergie d'Euler 2.3.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho E + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) + \nabla \cdot \Sigma \mathbf{v} + \rho F \mathbf{v} + \nabla \cdot q + \nabla \cdot q_R \quad (2.5)$$

- $\nabla \cdot \Sigma \mathbf{v}$ est le travail de la viscosité du fluide.
- $\nabla \cdot q + \nabla \cdot q_R$ est le travail de la chaleur sur le fluide.

L'équation de l'énergie de Navier-Stokes 2.5 ajoute à l'équation d'Euler 2.3 le travail de la viscosité et de la chaleur sur le fluide. Ainsi les fluides non adiabatiques sont également pris en compte par cette équation.

Dans la plupart des cas, l'équation de l'énergie n'est pas prise en compte lors de la simulation de fluides notamment à cause de la complexité du calcul.

2.4 Équation de Boltzmann

Les équations de Boltzmann sont utiles pour décrire le comportement de systèmes composés de particules, tels que les gaz ou les liquides.

Dans les équations de Boltzmann, chaque particule composant le système possède une vitesse et une position qui varient dans le temps en fonction des mouvements de la particule.

La fonction $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ donne alors la densité de probabilité de trouver une particule à une position \mathbf{x} avec une vitesse \mathbf{v} à un temps t .

L'objectif des équations de Boltzmann est donc de déterminer comment évolue cette fonction de densité de probabilité f au cours du temps.

La fonction de distribution évolue suivant les forces extérieures s'appliquant sur les particules, les collisions entre les particules et la diffusion des particules, qui tend à avoir la même concentration de particules dans tout le système. C'est pourquoi, la variation de la fonction de distribution peut s'écrire comme dans l'équation 2.6.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{force} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{diff} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.6)$$

2.4.1 Collisions négligées

Supposons qu'il n'y a pas de collision entre les particules. Cela signifie que les particules n'interagissent pas entre elles, ce qui n'entraîne aucune modification de la fonction de distribution f . Ainsi, la dérivée totale de f par rapport au temps t est nulle : $\frac{df}{dt} = 0$ car f ne varie pas dans le temps.



Grâce aux règles de chaînage, il est possible de trouver la dérivée totale de f par rapport au temps t , comme montrée dans l'équation 2.7.

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \left(\frac{dt}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f\end{aligned}\quad (2.7)$$

Dans l'équation 2.7, le terme $\frac{\partial f}{\partial t}$ montre le changement de f à vitesse et position constante, le terme $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f$ représente le changement de f dû aux déplacements des particules, et le terme $\frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f$ représente le changement de f dû aux forces extérieures, telles que la gravité, s'appliquant sur les particules. Ainsi, les déplacements des particules sont uniquement dûs aux forces extérieures et à la diffusion des particules, ce qui donne en combinant l'équation 2.7 et le fait que f ne varie pas en fonction du temps, l'équation 2.8.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = 0 \quad (2.8)$$

2.4.2 Collisions non négligées

Cependant, dans la réalité, des collisions existent entre les particules. Comme les particules interagissent entre elles, la fonction de distribution va subir des modifications en fonction des collisions. C'est pourquoi la dérivée totale de f par rapport à t ne sera plus égale à 0, mais au terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ qui capture l'effet des interactions entre les particules, ce qui donne la modification de l'équation 2.8 en l'équation 2.9.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.9)$$

L'équation 2.9 est appelée équation de Boltzmann. Il ne reste plus qu'à définir le terme de collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$, ce qui est une chose complexe qui ne va pas être traitée ici.



Chapitre 3

Méthode SPH

3.1 Histoire

La méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) a été inventée en 1977 par Bob Gingold et Joe Monaghan GINGOLD et MONAGHAN [8] et indépendamment par Leon Lucy LUCY [15] afin de simuler des phénomènes astrophysiques, tels que la formation et l'évolution d'une étoile ou d'une galaxie. Il s'agissait tout d'abord d'une approche probabiliste. Les équations de la mécanique des fluides pouvaient effectivement servir à décrire ce genre de phénomènes astrophysiques car il s'agit de gaz ou d'une multitude de corps évoluant d'une manière similaire à un liquide ou à un gaz.

La méthode SPH s'est ensuite développée dans le domaine de la mécanique des fluides où elle a servi notamment à modéliser non seulement des fluides compressibles et incompressibles, mais également des phénomènes thermiques et magnétiques.

Puis vers 1990, la méthode SPH a été étendue à la mécanique des structures afin de simuler par exemple des impacts à forte vitesse ou des déchirures de matériaux grâce notamment au travail de Libersky et Petschek (citation ici).

De nos jours, la méthode SPH est encore utilisée dans la mécanique des fluides, mais également pour simuler des impacts à haute vitesse, des fragmentations ou encore des explosions, si bien que le terme Hydrodynamics n'est plus adapté. Cependant, il est conservé pour des raisons historiques.

3.2 Interpolation

La méthode SPH utilise une technique d'interpolation afin de déterminer le résultat des équations de Navier-Stokes 2.3.

L'interpolation utilisée dans la méthode SPH est basée sur le principe que la distribution de Dirac $\delta(r)$, appelée par abus de langage fonction Dirac et définie dans l'équation 3.2, peut être considérée comme l'élément neutre de la convolution, comme nous montre l'équation 3.1. Étant une distribution de probabilité, la fonction Dirac respecte la propriété d'une distribution, donc on a la propriété 3.3.

$$\begin{aligned} f * \delta(x) &= \int_y f(y) \delta(y - x) \\ &= f(x) \end{aligned} \tag{3.1}$$

avec :

$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.2}$$

et :



$$\int \delta(x) dx = 1 \quad (3.3)$$

On définit donc une fonction noyau W qui est une approximation de la fonction Dirac et qui respecte les propriétés 3.4 et 3.5.

$$\int_r W(r, h) dr = 1 \quad (3.4)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(r, h) = \delta(r) \quad (3.5)$$

L'équation 3.1 devient alors l'équation 3.6.

$$\begin{aligned} f * W(x) &= \int_y f(y) W(y - x) \\ &\approx f(x) \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.3 Principes de base

La méthode SPH représente le fluide comme un ensemble de particules interagissant entre elles. Elle simule le comportement de chaque particule, donc il s'agit d'une méthode lagrangienne.

De plus, la méthode SPH est une méthode sans maillage, ce qui signifie en d'autres termes qu'elle ne nécessite pas de maillage fixe. Cela implique que la méthode SPH peut être utilisée avec une taille de domaine adaptative, et est donc particulièrement indiquée pour des problèmes complexes car seule la quantité de calcul nécessaire sera effectuée. Par exemple, si on pense à simuler un verre d'eau se renversant sur une table, la méthode SPH ne calculera que les endroits où le fluide est présent et non pas toute la surface de la table comme le ferait une méthode avec maillage fixe qui devrait définir un domaine de calcul fixe et s'y tenir.

Elle n'a pas besoin d'une grille fixe pour résoudre les équations du fluide.

Comme la méthode SPH est une méthode sans maillage, elle utilise une technique d'interpolation afin de déterminer le résultat des équations aux dérivées partielles.

La méthode SPH simule le fluide comme un ensemble de particules. Ces particules possèdent leurs caractéristiques propres telles que leur masse, leur position, leur vitesse. Une particule interagit avec les particules l'avoisinant à travers un noyau de lissage W . Cependant, une particule ne peut pas interagir avec toutes les particules... Autrement dit, on ne veut pas qu'une particule à une extrémité du fluide interagisse avec une particule à l'autre extrémité du fluide. C'est pourquoi, une distance h est fixée afin de limiter l'influence d'une particule sur celles se trouvant dans son rayon d'action. Ainsi, on peut définir une équation 3.7 qui décrit comment une propriété physique A_S à un point donné du fluide est calculée grâce aux propriétés physiques A_i des particules avoisinant le point donné, propriétés pondérées par le noyau de lissage W donnant l'influence des particules avoisinantes, comme le montre la figure 3.1.

$$A_S(r) = \sum_i m_i \frac{A_i}{\rho_i} W(r - r_i, h) \quad (3.7)$$

avec :

- m_i la masse de la particule i .
- A_i une propriété de la particule i .
- ρ_i la densité de la particule i .
- W le noyau utilisé pour l'interpolation.
- h le rayon d'influence du noyau d'interpolation. Ainsi, on a $W = 0$ si $|r - r_i| > h$.

La méthode SPH donne donc les propriétés physiques d'un point donné par une combinaison des propriétés des particules voisines. Dans notre cas, la méthode SPH résout l'équation de la conservation de la masse 2.1 et l'équation de la conservation de la quantité de mouvement 2.4, mais pas l'équation de la conservation de l'énergie 2.5, car la température n'est pas prise en compte.



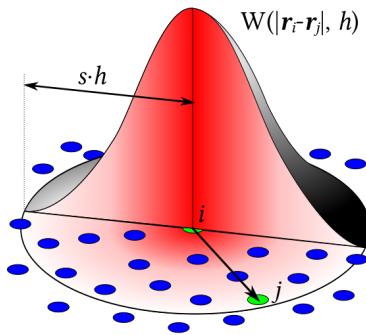


Figure 3.1: créée par JLCERCOS [11]

Pour plus de précisions, consultez le travail de thèse de Fabien Caleyron CALEYRON [2], mais également le travail de master de Marcus Vesterlund VESTERLUND [20] et le travail de thèse de Alban Vergnaud VERGNAUD [19]. Cette partie a été écrite principalement avec les informations données par VESTERLUND [20] et VERGNAUD [19].

Chapitre 4

Méthode LBM

4.1 Histoire

La “Lattice Boltzman Method” (LBM) est basée sur la méthode “Lattice Gaz Automata” (LGA) développée pen 1973 ar J. Hardy, Y. Pomeau et O. de Pazzis [9] sous le nom de méthode HPP. Cette méthode était basée non pas sur les équations de Navier-Stokes 2.3, mais sur les équations de Boltzmann 2.4.

En 1986, U. Frisch, B. Hasslacher et Y. Pomeau ont réussi à obtenir les équations de Naiver-Stokes à partir de la méthode LGA en utilisant une lattice hexagonale [7]. La méthode LGA rencontrait des difficultés, notamment un bruit statistique causé par les approximations de la méthode LGA.

Pour pallier à ce problème, G. McMamara et G. Zanetti ont décidé de négliger les corrélations entre les particules et ont intégré la notion de fonction de distribution moyenne dans leur travail [16], ce qui a donné naissance à la méthode LBM. Puis en 1989, Higuera et Jimenez ont simplifié la méthode LBM en définissant un opérateur de collision linéaire [10]. Et enfin, un opérateur de collision basé sur le travail de Bhatnagar, Gross et Krook [1] a été utilisé simultanément par Koelman [12] et par Chen et al. [4].

De nos jours, la méthode LBM est devenue populaire car elle présente une nouvelle approche efficace dans le domaine “Computational Fluid Dynamics” (CFD) carj elle ne cherche pas à résoudre directement les équations de Navier-Stokes 2.3, contrairement à la méthode SPH.

4.1.1 Principes de base

Comme expliqué dans la section 2, un fluide est composé de plusieurs particules liées entre elles par des liaisons faibles.

La méthode LBM considère que le fluide peut être représenté par un ensemble de populations, qui sont des groupes de particules comme nous montre la figure 4.1.

Ainsi, ce ne sont pas des particules, mais des groupes de particules qui sont représentés, c'est pourquoi la physique appliquée ne sera pas déterministe, mais probabiliste.

Comme expliqué dans la section 4.1, la méthode LBM ne repose pas sur les équations de Navier-Stokes 2.3, mais sur l'équation de Boltzmann 2.4, utilisée et adaptée pour résoudre les équations de Navier-Stokes 2.3. Cependant, la méthode LBM n'est pas un solveur pour l'équation de Boltzmann 2.4.

4.2 Représentation et fonction de distribution

Dans la méthode LBM, le système est représenté comme un ensemble de particules dans une grille ou une lattice, comme nous le montre la figure 4.1. Le but est alors de savoir comment vont évoluer ces particules dans la grille, comment celles-ci vont interagir entre elles, quel est leur mouvement moyen dans le système et quelle est leur vitesse.

Dans les équations de Navier-Stokes 2.3, il n'y a que 2 variables, soit la position et le temps, tandis que dans la méthode LBM, la vélocité des molécules est également perçue comme une variable qui pourra



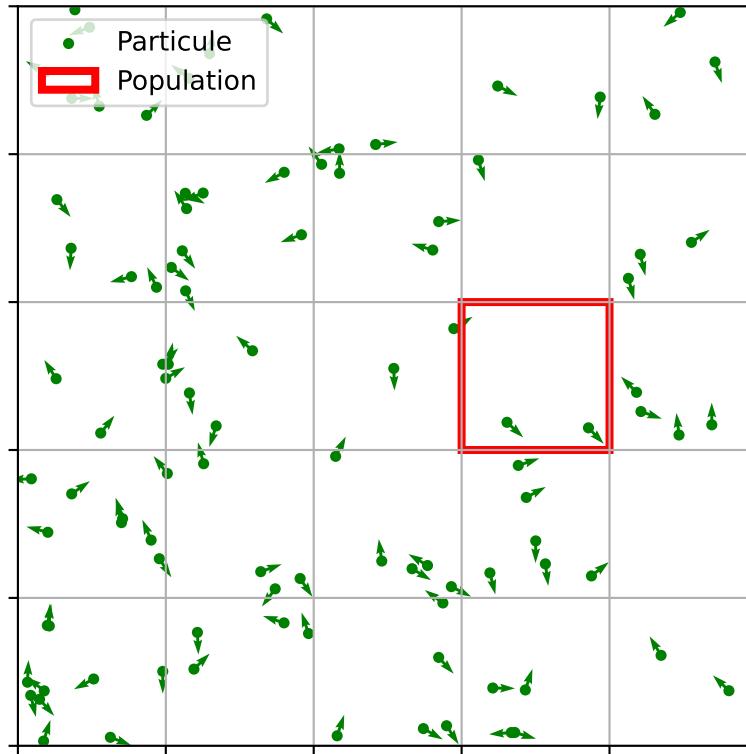


Figure 4.1: Représentation des populations de particule

être nommée ξ et qui décrit le changement de position \mathbf{x} de la molécule en fonction du temps t , comme nous le montre l'équation 4.1.

$$\xi = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (4.1)$$

Comme dans l'équation de Boltzmann 2.4, la fonction de distribution $f(\xi, \mathbf{x}, t)$ donne le nombre de molécules à une position \mathbf{x} et à un temps t qui se déplacent avec une vitesse $\|\xi\|_2$ dans une direction ξ .

La fonction de distribution f est normalisée afin que l'intégration sur la vitesse et la position donne la masse du système, comme nous le montre l'équation 4.2.

$$\int d^3\xi \int d^3\mathbf{x} f(\xi, \mathbf{x}, t) = M(t) \quad (4.2)$$

4.2.1 Moments de la fonction de distribution

Il est possible de calculer les moments de la distribution f .

Ce qui est tout particulièrement intéressant est de calculer les moments de la distribution f en fonction de la vitesse des molécules ξ . Cela permet de relier la description à l'échelle des groupes de molécules, c'est-à-dire la description mésoscopique, à la description macroscopique du fluide telle que la densité, la pression ou encore la vitesse du fluide. En effet, les propriétés globales du fluide sont dégagées grâce au suivi des contributions de chaque groupe de molécules.

4.2.1.1 Moment d'ordre 0

Le moment d'ordre 0 par rapport à ξ peut se calculer comme dans l'équation 4.3. Il permet d'obtenir la densité ρ du fluide à une position \mathbf{x} et à un temps t car l'intégration en fonction de la vitesse des particules a pour résultat de prendre chaque particule sans tenir compte de leur vitesse. Ce qui donne la densité de particules en une position \mathbf{x} pour un temps t .

$$\int d^3\xi f(\xi, \mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (4.3)$$

4.2.1.2 Moment d'ordre 1

Le moment d'ordre 1 par rapport à ξ de la fonction de distribution f peut s'obtenir comme montré dans l'équation 4.4.

$$\int d^3\xi \xi \cdot f(\xi, \mathbf{x}, t) = \rho u(\mathbf{x}, t) \quad (4.4)$$

Dans l'équation 4.4, la fonction u est une fonction donnant la vitesse globale du fluide à une position \mathbf{x} et à un temps t . En d'autres termes, cela donne la vitesse macroscopique du fluide en une position et à un temps donnés.

La quantité de mouvement est alors obtenue par l'équation 4.4 car elle donne la multiplication de la densité avec la vitesse.

4.2.1.3 Moment d'ordre 2

La pression du fluide est liée au moment d'ordre 2 de la fonction de distribution, ce qui ne va pas être détaillé ici par souci de simplicité.

4.3 Évolution de la fonction de distribution en fonction du temps

La fonction de densité f contient toutes les propriétés locales du fluide.

Mais comment la fonction f évolue-t-elle au cours du temps ?

Afin de répondre à cette question, il suffit d'observer la dérivée totale de f en fonction du temps t , ce qui est calculé dans l'équation 4.5 grâce aux règles de chaînage et aux définitions de la vitesse ξ 4.1.

$$\begin{aligned} \frac{df(\xi, \mathbf{x}, t)}{dt} &= \left(\frac{dt}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{d\xi}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \right) f(\xi, \mathbf{x}, t) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{F}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \right) f(\xi, \mathbf{x}, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} f + \xi \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{F}{\rho} \cdot \nabla_{\xi} f \end{aligned} \quad (4.5)$$

Dans l'équation 4.5, la force F est appliquée sur une masse volumique ρ plutôt que sur la masse m de chaque particule. C'est pourquoi, grâce à la relation entre la force, la masse et l'accélération de la 2ème loi de Newton, on obtient le terme $\frac{F}{\rho}$.

4.3.1 Opérateur de collision Ω

Comme expliqué dans la section 2.4.2, lorsque les collisions ne sont pas négligées, la variation de la fonction de distribution f est donnée par les collisions entre les particules. C'est pourquoi un opérateur de collision Ω est défini.

Décrire précisément les collisions entre les particules est une chose difficile et coûteuse.

Cependant, grâce au travail de Bhatnagar, Gross et Krook (BGK) [1], comme le système va tendre vers un état équilibré f^{eq} à partir de l'état non équilibré f , l'opérateur de collision peut être simplifié en la relaxation de f vers f^{eq} comme l'équation 4.6 le démontre, avec τ le temps de relaxation.

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}) \quad (4.6)$$



La simplification donnée par l'équation 4.6 est suffisante pour obtenir le comportement des équations de Navier-Stokes 2.3.

4.4 Computation de la méthode LBM

Dans cette partie, la définition $\mathbf{v} = \xi - \mathbf{u}$ est la vitesse du centre de masse d'une population de particules et les collisions entre particules sont considérées comme étant élastiques ce qui signifie que la masse, le moment et l'énergie sont conservés.

4.4.1 Distribution d'équilibre f^{eq}

La distribution d'équilibre f^{eq} doit dépendre de la densité ρ , de la vitesse du centre de masse \mathbf{v} et de la température T qui donne le degré d'agitation des particules. De plus, elle ne doit pas dépendre de la direction de la vitesse \mathbf{v} , donc elle doit être isotropique. Après des dérivations, la distribution d'équilibre est donnée par l'équation 4.7, qui est une simplification de la distribution de Maxwell-Boltzmann donnant la distribution des vitesses des particules dans un gaz à l'équilibre thermique.

$$f^{eq}(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) = \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{|\mathbf{v}|^2}{2RT}} \quad (4.7)$$

4.4.2 Discrétisation

Il ne reste plus qu'à discréteriser la fonction de distribution f . La discrétisation donne :

- $\mathbf{x} \rightarrow \Delta \mathbf{x}$ avec $\Delta \mathbf{x}$ qui est l'espace occupé par une population. Ainsi, l'espace est divisé en plusieurs noeuds chaque noeud représentant l'espace occupé par une population. Par exemple dans la figure 4.1, Δx sera un carré de la grille.
- $t \rightarrow \Delta t$ avec Δt qui est en général un intervalle de temps fixé, bien qu'il soit possible de modifier dynamiquement Δt .
- $f(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) \rightarrow f_i(\mathbf{x}, t)$ pour la vitesse \mathbf{v} . En fait, \mathbf{v} est un vecteur. Il peut donc prendre une infinité de directions et de valeurs. C'est pourquoi, la discrétisation de la vitesse consiste à déterminer un nombre limité de directions et de valeurs pour le vecteur vitesse \mathbf{v} . Par exemple, la figure 4.2 illustre les vitesses que peut prendre une population. La notation D2Q9 indique que l'espace possède 2 dimensions et que seulement 9 vitesses sont possibles pour une population. c_i est alors défini comme dans l'équation 4.8 ce qui permet de définir q populations $f_i(\mathbf{x}, t)$, une pour chaque c_i et de donner les équations 4.9 et 4.10 qui sont simplement une somme de quelques termes obtenus grâce à un mécanisme mathématique appelé "Hermite expansion".

$$(c_i) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t} \quad (4.8)$$

$$\sum_i^{q-1} f_i(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (4.9)$$

$$\sum_i^{q-1} c_i f_i(\mathbf{x}, t) = \rho u(\mathbf{x}, t) \quad (4.10)$$

Ainsi, par cette discrétisation, les particules se déplacent soit dans un noeud voisin, soit restent sur place. Donc la discrétisation de la vitesse est parfaitement alignée sur la discrétisation du temps et de l'espace.

Les discrétisations introduites permettent de discréteriser également la fonction de distribution équilibrée comme montré dans l'équation 4.11 avec w_i le poids d'une population qui dépend du déplacement ou de l'immobilité de cette dernière.

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{c_i \cdot u}{c_S^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2c_S^4} - \frac{u \cdot u}{2c_S^2} \right) \quad (4.11)$$

La variable c_S représente la vitesse du son et est définie dans l'équation 4.12.



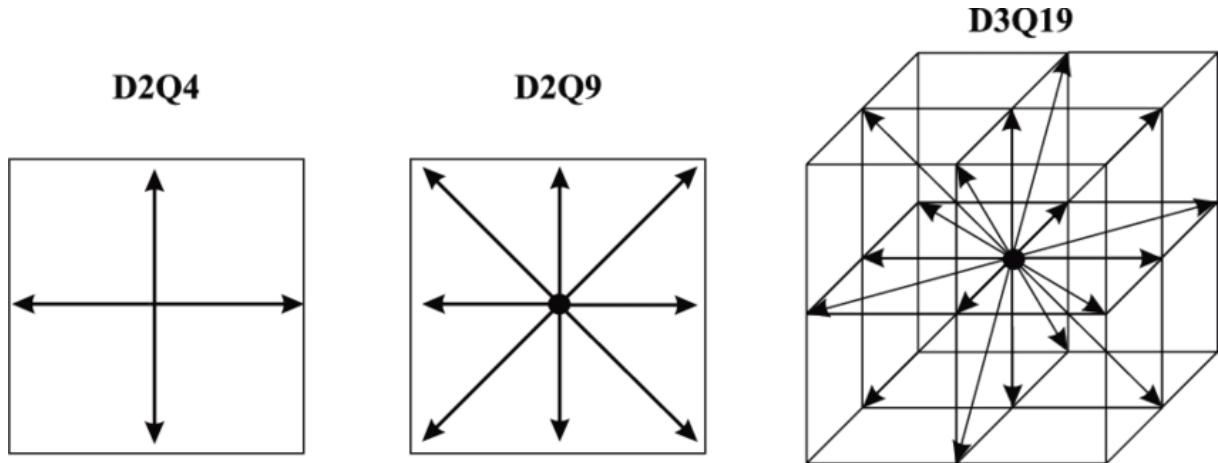


Figure 4.2: prise du travail de Körner et al. [13]

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.12)$$

4.4.3 Lattice Boltzmann Equation (LBE)

L'objectif est de savoir pour une fonction de distribution f donnée, comment celle-ci évoluera au temps $t + \Delta t$.

La “Lattice Boltzmann Equation” (LBE) ou “Lattice BGK equation” est alors définie comme dans l'équation 4.13.

$$\frac{df}{dt} \approx f_i(\mathbf{x} + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) = \Omega_i \quad (4.13)$$

Ce qui peut se réécrire comme l'équation 4.14.

$$f_i(\mathbf{x} + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (4.14)$$

Dans l'équation 4.14, le terme de relaxation donne un déplacement ou une redistribution de la population i , qui ne s'est pas encore déplacée. Elle est ensuite propagée vers ses voisins.

Les avantages sont que les collisions sont locales et algébriques : c'est un algorithme très simple pour les collisions et la propagation est linéaire et exacte, ce qui signifie que l'on peut décomposer le solveur 4.14 en étape de collision et de propagation.

4.4.4 Viscosité

Les équations de Navier-Stokes 2.3 utilisent le terme de viscosité tandis que l'équation de Boltzmann 2.4 utilise le terme de temps de relaxation.

Les 2 termes sont liés par l'équation 4.15 avec la vitesse du son c_s définie dans l'équation 4.12.

$$\Sigma = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (4.15)$$

4.4.5 Algorithme

- La condition initiale f_i est connue. Ainsi, il est possible de calculer la densité et la vitesse par la somme des moments de f .

- La distribution équilibrée peut donc être calculée grâce à la condition initiale f_i car elle ne dépend que de la densité et de la vitesse, qui ont pu être calculées précédemment.
- La distribution post collision $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t))$ est ensuite calculée grâce à la distribution équilibrée et à la condition initiale car le temps de relaxation est fixé afin d'avoir une viscosité donnée. Elle donne comment les populations sont redistribuées dans l'espace des vitesses, mais ne déplace pas les populations. Il s'agit de l'étape collision de la figure 4.3.
- La propagation de la distribution post collision f_i^* aux voisins : $f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(x, t)$. C'est l'étape propagation de la figure 4.3. Cela est représenté dans la figure 4.3.

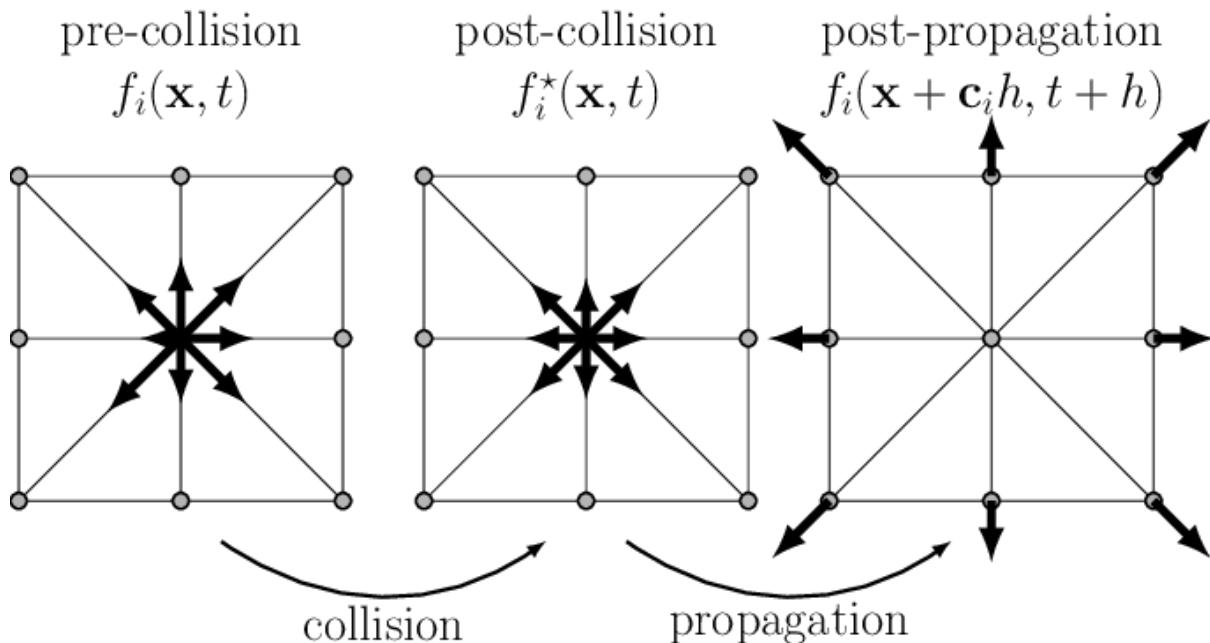


Figure 4.3: prise dans le travail de Schiller et al. [18]

Notez que:

- La masse et la quantité de mouvement sont conservées car : $\sum_i \Omega_i = 0$ et $\sum_i c_i \Omega_i = 0$.
- Les analyses de Chapman-Enskog [3] et [6] montrent que les LBE 4.4.3 sont suffisantes pour retrouver le comportement de Navier-Stokes 2.3.

Chapitre 5

La containerisation

Dans ce rapport, beaucoup de théorie a déjà été faite sur différentes méthodes de simulation de fluides. Cela est dû en grande partie parce qu'il est important de savoir comment fonctionnent ces méthodes, d'autant plus que l'essor de l'intelligence artificielle met sur le plan secondaire l'implémentation du code.

Je me permettrai d'utiliser un jargon informatique dans ce chapitre pour plus de clarté. Pour la petite histoire, un jour ma mère m'a demandé ce que j'avais fait, et je lui ai répondu "J'ai enlevé des insectes de ma poubelle" ce qui signifie en jargon informatique "j'ai enlevé des bugs dans mon container"

Dans ce chapitre, la containerisation sera étudiée de plus près car elle a grandement fait partie de mon projet de bachelor.

En effet, j'ai dû reprendre une application qui datait de 2017-2018 et qui ne fonctionnait plus car elle n'était plus compatible avec les librairies actuelles. Une tentative infructueuse a été faite pour installer les librairies datant de 2017-2018. Pour exécuter le code, il a donc fallu modifier celui-ci afin de le rendre compilable.

Cependant, comment compiler le code sur plusieurs machines différentes n'ayant pas forcément les mêmes librairies installées ? C'est à cet instant que la containerisation a montré toute son utilité.

5.1 Notions générales

Un ordinateur ne comprend que des zéros et des uns, ce qui n'est pas le cas de l'homme. C'est pourquoi, il y a toujours un système d'exploitation qui tourne sur l'ordinateur afin de servir d'interface entre l'homme et la machine. Un système d'exploitation est composé d'un noyau ou kernel, d'outils systèmes et de librairies permettant à l'utilisateur d'interagir avec la machine, contrôlée par le noyau.

Une machine virtuelle (VM) est une émulation d'un système informatique physique, créée par un logiciel de virtualisation. Elle permet d'exécuter un système d'exploitation complet et ses applications sur un matériel virtuel, indépendamment du matériel physique sous-jacent. Les machines virtuelles offrent une isolation forte, une grande flexibilité et sont largement utilisées dans diverses applications informatiques (ChatGPT).

Les machines virtuelles sont gérées par un hyperviseur, comme il est possible de le voir sur la figure 5.1b, qui s'occupe alors notamment de l'isolation et de la gestion des ressources des machines virtuelles.

Ainsi, il est possible de mettre une application sur une machine virtuelle car toutes ses dépendances pourront être installées sur le système d'exploitation du matériel virtuel. L'application pourra alors fonctionner sur n'importe quel matériel physique possédant un hyperviseur pour machines virtuelles.

Cependant, un système d'exploitation occupe beaucoup de mémoire. Par exemple, Windows 10 occupe environ 20Go de mémoire. Donc est-ce nécessaire de déployer une machine virtuelle pour une application qui fait seulement 10Mo ? Ou alors est-ce une perte de place ? Et est-ce vraiment utile d'avoir toutes les fonctionnalités du système d'exploitation pour déployer l'application, ou peut-on se contenter de seulement quelques fonctionnalités ?



Les containers apportent une solution à ce problème. En effet, un container ne virtualise non pas le matériel, comme le stockage ou la mémoire, mais un système d'exploitation, ce qui signifie que le container n'a pas besoin d'avoir son propre système d'exploitation. C'est un grand gain de stockage. Cela permet également de n'utiliser que les fonctionnalités du système d'exploitation qui sont nécessaires au bon fonctionnement du container. Il en résulte que les containers ont un impact beaucoup plus faible sur les performances du matériel physique qu'une machine virtuelle. Le principe du container est simple : mettre dedans le code et toutes ses dépendances afin de pouvoir l'exécuter sur n'importe quel système. Les containers sont gérés par un démon, comme le montre la figure 5.1a.

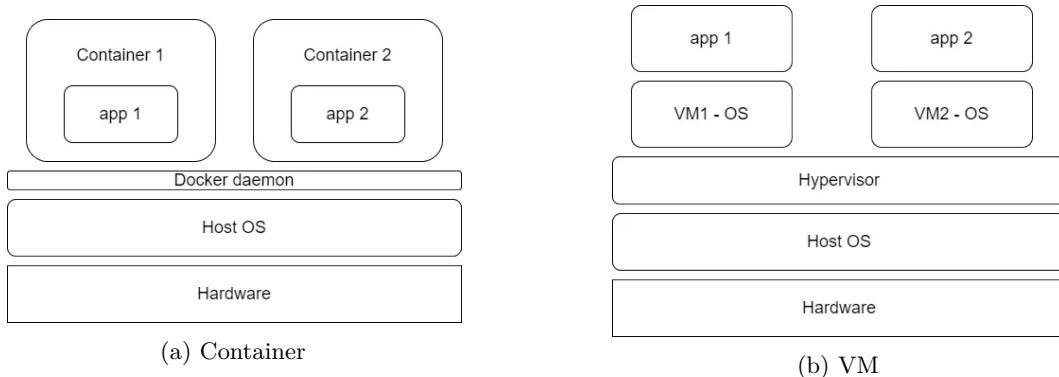


Figure 5.1: Virtual Machine (VM) et container [17]

5.2 Pourquoi utiliser la containerisation ?

Dans mon projet de bachelor, je me suis occupé de rendre fonctionnel un code qui n'a pas eu de maintenance depuis 2018 environ.

J'ai donc dû comprendre ce qui ne fonctionnait pas et le rendre exécutable, ce qui fut un défi résolu avec succès. Ici, si l'auteur du code avait créé un container, je n'aurais pas eu besoin de mettre à jour le code, ce qui aurait été beaucoup plus simple.

À ce moment, je ne m'étais toujours pas penché sur la containerisation.

Cependant, le projet avançant, je me suis heurté à des comportements spéciaux du code, et comme celui-ci utilise une carte graphique NVIDIA, je ne pouvais pas montrer à mon professeur encadrant mes problèmes afin de profiter pleinement de ses conseils. Mais mon professeur possède des serveurs distants équipés de cartes graphiques NVIDIA.

L'objectif était donc d'exécuter le code sur le serveur distant, mais des problèmes de librairies manquantes entre autres sont apparus.

C'est alors que la containerisation a pris toute son importance.

L'idée est d'exécuter un container et d'afficher le résultat graphique du container.

Pour cela, il faut comprendre les mécanismes régissant l'affichage X11.

5.3 Affichage X11

L'affichage X11 est composé notamment de :

- Un serveur Xorg ou X11 qui gère l'affichage et les périphériques d'entrée tels que la souris et le clavier. Lors de son démarrage, le serveur X11 crée un socket permettant la communication inter-processus sans passer par le réseau et un fichier de stockage de "magic cookies", généralement appelé **.Xauthority**, afin d'identifier les clients souhaitant afficher quelque chose. Le socket sera à l'écoute des connections des applications clientes. Le chemin d'accès au fichier **.Xauthority** est mis dans la variable **\$XAUTHORITY**. Lorsqu'une application voudra afficher quelque chose, elle se connectera au socket créé par le serveur et discutera avec celui-ci grâce au socket.

- De “magic cookies” qui sont des jetons d’authentification permettant d’accéder au serveur X11. Ils utilisent le hostname, le type de connection et le numéro d’affichage afin de composer un identifiant pour le jeton d'accès. Dans l'exemple de “magic cookies” suivant, lizzy est le hostname de mon ordinateur, combiné avec le type de connection qui est unix et le numéro d'affichage.

```
lizzy/unix:0 MIT-MAGIC-COOKIE-1 a35332ba55ab1ea7b8b890cd78a6644
```

Lorsque le client s'est connecté au socket, il doit s'authentifier auprès du serveur X11, ce qui est fait par l'extraction du “magic cookie” du fichier `.Xauthority` et par l'envoi de ce cookie au serveur. Le serveur décide alors si le client a la permission d'afficher ou non. - Une variable d'environnement `'$DISPLAY'` utilisée afin d'indiquer à l'application cliente quel socket utiliser. La variable d'environnement est composée de la sorte : `hostname:numéro_d_affichage.numéro_du_serveur_X11`

- Le hostname indique le nom du host où se trouve le serveur X11.
- Le numéro d'affichage indique où l'application devra être affichée.
- Le numéro du serveur X11 est utile s'il y a plusieurs serveurs X11 qui tournent sur une machine.

Il est possible que la variable `$DISPLAY` soit sous la forme `:0.0`. Dans ces conditions, cela signifie que l'affichage se fera sur le serveur X11 local, ce qui peut également s'écrire comme `localhost:0.0`.

La variable d'environnement permet d'indiquer au client le socket à utiliser.

5.4 Affichage d'un container sur ordinateur

Toute sorte de codes peuvent être exécutés dans un container, notamment du code donnant un rendu visuel. La difficulté consiste alors à afficher le rendu visuel sur l'écran, ce qui peut être résolu grâce à la section [5.3](#).

Donc pour afficher le rendu visuel du code, il faut donner lors de l'exécution du container la variable d'environnement `$DISPLAY` pour que le container sache quel socket utiliser. Le socket responsable de la connection avec le serveur et le fichier contenant les cookies d'authentification doivent être partagés, ainsi que le même hostname que l'ordinateur sur lequel tourne le container afin que celui-ci puisse trouver le bon cookie à envoyer au serveur, ce qui est illustré par la figure [5.2](#).

Il se peut toutefois que le fichier contenant les cookies n'existe pas. C'est pourquoi, il faut d'abord penser à le créer, puis à créer les cookies.

Cela donne avec docker :

```
# Vérifier que .Xauthority existe
# et le créer avec les cookies du display actuel le cas échéant
if [ ! -e $HOME/.Xauthority ] then
    touch $HOME/.Xauthority
    xauth generate $DISPLAY . trusted
    export XAUTHORITY=$HOME/.Xauthority
fi

docker run --gpus all --runtime nvidia \
-e DISPLAY=$DISPLAY \ # Partage de la variable $DISPLAY
-e XAUTHORITY=/home/user/.Xauthority \ # Indication de la location de .Xauthority
-v /tmp/.X11-unix:/tmp/.X11-unix \ # Partage du socket X11
-v $XAUTHORITY:/home/user/.Xauthority \ # Partage des cookies
--hostname $(hostname) \ # Partage du hostname
mon-application # Image de l'application graphique
```

5.5 Affichage d'un container sur serveur distant

Le fait de pouvoir avoir le rendu visuel d'un container docker est une bonne chose, mais il fallait pouvoir avoir un rendu sur un serveur distant.

Le container s'exécute alors sur un serveur distant.



Une connection ssh avec l'option -X est alors établie afin d'afficher sur l'ordinateur le résultat graphique produit sur le serveur.

Comme le montre la figure 5.3, la connection ssh crée un socket TCP qui transfert par tunnel ssh la sortie visuelle de ce qui est exécuté sur la machine distante. Le souci est que le socket TCP n'est pas partageable au container à exécuter. C'est pourquoi, un socket unix redirigé vers le socket TCP est utilisé afin d'envoyer l'affichage dans le tunnel ssh, ce qui est fait au moyen de la commande `socat`. Notez ici que le socket TCP est identifié par la variable `$DISPLAY` qui est sous la forme `localhost:10` indiquant que le socket TCP écoute sur le port $6000 + 10 = 6010$ pour le transfert X11. Il faut ensuite bien définir la variable `$DISPLAY` du container afin que celle-ci pointe bien sur le bon socket, c'est à dire le socket unix. L'authentification du client suit exactement le même principe que pour l'affichage sur un ordinateur 5.4.

Ainsi il est possible d'écrire le script suivant :

```
#!/bin/bash

# Prise du numéro d'affichage
DISPLAY_NUMBER=$(echo $DISPLAY | cut -d. -f1 | cut -d: -f2)

# Création de .Xauthority s'il n'existe pas
if [ ! -e $HOME/.Xauthority ]; then
    touch $HOME/.Xauthority
    xauth generate :$DISPLAY_NUMBER . trusted
    export XAUTHORITY=$HOME/.Xauthority
fi

# Test si on est sur un serveur distant
# et liaison du socket TCP de la connection ssh
# avec le socket UNIX
if echo $DISPLAY | grep -q "localhost"; then
    socat UNIX-LISTEN:/tmp/.X11-unix/X${DISPLAY_NUMBER},fork TCP4:localhost:60${DISPLAY_NUMBER} &
fi

# Lancement de l'application graphique
docker run --gpus all --runtime nvidia \
-e DISPLAY=:${DISPLAY_NUMBER} \
-e XAUTHORITY=/home/user/.Xauthority \
-v /tmp/.X11-unix:/tmp/.X11-unix \
-v $XAUTHORITY:/home/user/.Xauthority \
--hostname $(hostname) \
mon-application
```

5.6 Limitations

Cette étape était très intéressante, mais également très chronophage.

En effet, l'application ne marchait tout de même pas sur le serveur du professeur à cause d'une librairie utilisée par le code, notamment la librairie OpenGL.

J'ai donc tenté d'utiliser mon ordinateur fixe, afin de voir si le problème persistait. Pour cela, une installation et une configuration d'un serveur ssh sécurisé sur mon ordinateur et une reconfiguration de mon routeur a été nécessaire afin d'autoriser les connections depuis l'extérieur. Malheureusement le problème de librairie était toujours présent et la solution au problème n'a pas encore été trouvée.



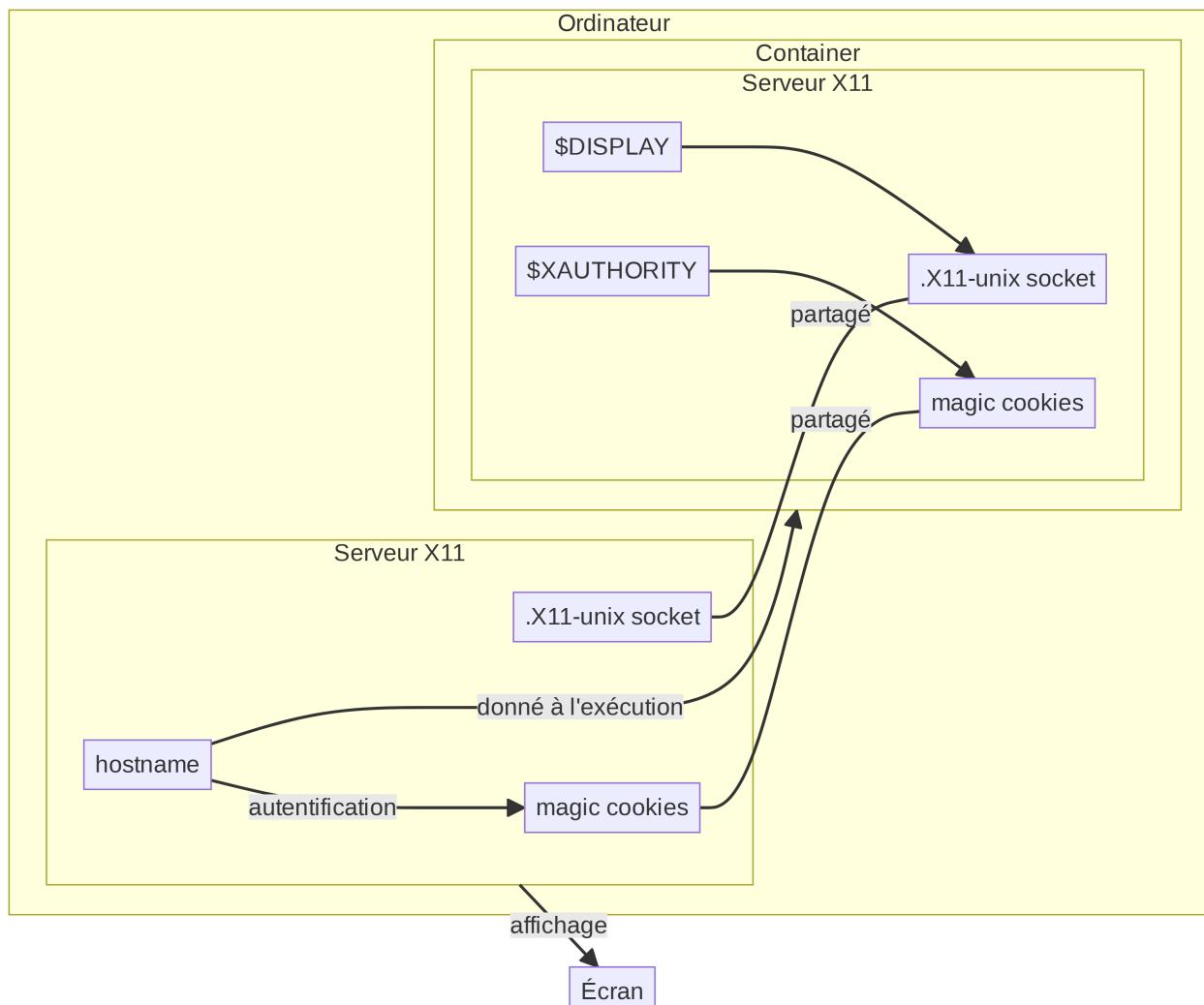


Figure 5.2: Schéma de l'affichage d'une application graphique tournant dans un container sur un ordinateur

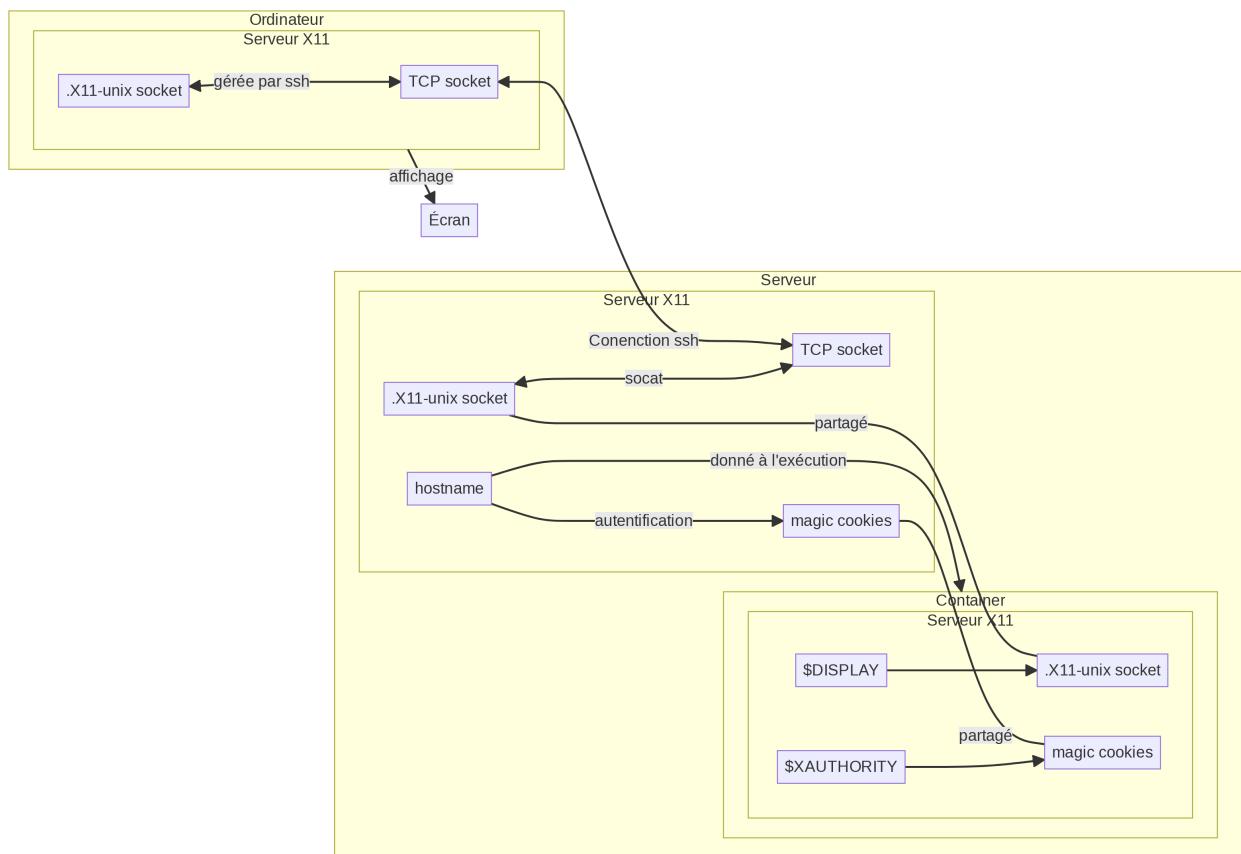


Figure 5.3: Schéma de l'affichage d'une application graphique tournant dans un container sur un serveur distant

Chapitre 6

LBM VS SPH

6.1 Introduction

Après avoir vu la théorie sur la méthode SPH [3](#) et la méthode LBM [4](#), nous pouvons procéder à une comparaison entre deux codes implémentant chacun une de ces méthodes.

- Le premier code est le code de GVDB-Voxel implémentant la méthode SPH.
- Le deuxième code est le code de FluidX3D implémentant la méthode LBM.

Comme cela avait été mentionné précédemment, le code de GVDB-Voxel n'a pas été maintenu depuis au moins 4 ans, ce qui a donné des problèmes d'incompatibilité entre les versions des librairies et le code, à la différence du code de FluidX3D qui est en cours de développement par le Dr Moritz Lehmann, dont le projet de master a servi à la compréhension de la méthode LBM.

Les deux codes proposés présentent chacun des caractéristiques différentes, tant par la méthode utilisée pour simuler des fluides en temps réel que par les outils et technologies utilisées.

Dans la suite du travail, l'objectif sera de comparer ces deux codes.

6.2 Comparaison théorique

Le code de GVDB-Voxel implémente, comme mentionné précédemment, la méthode SPH alors que le code de FluidX3D implémente la méthode LBM.

Ces deux méthodes ont une façon totalement différente d'approcher le problème de la simulation de fluides.

6.2.1 Approche utilisée

La méthode SPH tente une approximation directe des équations de Navier-Stokes [2.3](#) tandis que la méthode LBM utilise l'équation de Boltzmann [2.4](#) afin de retrouver le comportement des équations de Navier-Stokes [2.3](#), autrement dit, la méthode LBM résoud indirectement les équations de Navier-Stokes. Ce qui lui permet, à la différence de la méthode SPH, d'intégrer relativement facilement des effets thermiques grâce à l'utilisation des fonctions de distribution pour les énergies.

En utilisant l'équation de Boltzmann [2.4](#), la méthode LBM possède un plus grand nombre de paramètres que les méthodes résolvant directement les équations de Navier-Stokes, car la vitesse de chaque groupe de particules ou population est prise en compte. De plus, cela permet de ne pas avoir à résoudre directement les équations de Navier-Stokes, ce qui en fait une méthode rapide car aucune équation de poisson n'est à résoudre, et cela permet également de simuler des fluides à micro-échelle où les interactions moléculaires sont significatives.

6.2.2 Maillage

La méthode SPH est une méthode sans maillage alors que la méthode LBM est composée d'un maillage. Cela permet à la méthode SPH de définir un domaine adaptatif qui varie en fonction des besoins de la



simulation à la différence de la méthode LBM qui possède un domaine fixe. Un autre avantage conféré à la méthode SPH par cet absence de maillage est une facilité d'adaptation à des changements topologiques comme la fragmentation ou la fusion de fluides, et une simplicité de définition des conditions aux frontières, bien qu'il soit toujours très complexe d'obtenir de bons résultats. Cependant, la méthode LBM est également capable de gérer des frontières complexes, comme des frontières en mouvement ou des géométries complexes grâce à sa localité qui lui confère une flexibilité sur la définition des conditions aux limites.

Mais la méthode SPH a plus de difficultés à traiter des conditions aux limites solides car cela peut nécessiter des techniques spéciales afin de modéliser l'interaction entre le fluide et la surface solide, ce qui est beaucoup plus simple dans le cas d'une méthode avec un maillage.

Il résulte néanmoins du fait que la méthode LBM soit une méthode avec maillage que la précision est dépendante du maillage choisi, bien qu'il existe des méthodes de raffinement de maillage ou de grille adaptative afin de palier à ce problème.

6.2.3 Phénomènes physiques

La méthode LBM perd en efficacité dans les simulations d'écoulements à haute vitesse ou d'écoulements compressibles, car des corrections doivent être effectuées ce qui complexifie l'implémentation. Mais la méthode SPH n'est également pas très efficace dans les simulations d'écoulements à haute vitesse, car cela requiert un nombre plus élevé de particules, et donc de temps de calcul, de mémoire, etc... Par contre la méthode SPH est très efficace pour simuler des phénomènes avec des variations rapides de densité et de pression, comme des explosions ou des fluides compressibles.

Comme vu précédemment, la méthode SPH est également utilisée pour la simulation d'explosions, de fragmentation de matériaux, d'impact à haute vitesse, etc... La méthode LBM ne permet pas de faire cela, cependant, elle possède des applications multi-physiques telles que les écoulements multiphasiques comme les interactions entre fluides immiscibles, les interactions entre fluide et structure déformable ou rigide, les transferts de chaleur, les réactions chimiques et la combustion dans les fluides, les écoulements à petite échelle, etc...

La méthode LBM permet également de simuler des fluides non newtoniens à la différence de la méthode SPH qui requiert des modifications afin de modéliser des fluides non newtoniens.

6.3 Comparaison technologique

6.3.1 Performances

6.3.1.1 Calcul parallèle

La méthode LBM, comme vu dans la section [4.4.5](#), permet de facilement séparer les étapes pour calculer le comportement du fluide.

En effet, la méthode LBM est locale et les calculs de propagation et de collision peuvent être faits localement, indépendamment, sur chaque partie du maillage.

Il en résulte que la méthode LBM est particulièrement adaptée au calcul parallèle et hautement scalable car lorsque la puissance de calcul augmente, l'overhead, qui est une mesure de la puissance de calcul inutilisée, reste à peu près constant.

Le fait que cette méthode soit hautement parallélisable et scalable la rend très attractive de nos jours.

La méthode SPH est également adaptée au calcul parallèle.

En effet, la méthode SPH représente le fluide comme un ensemble de particules qui interagissent entre elles. Cependant elles n'interagissent pas avec toutes les particules mais seulement avec des particules dans un certain rayon défini lors de l'initialisation de la simulation, comme l'illustre l'image [3.1](#). Ainsi, grâce à la localité des interactions entre particules, il est possible de diviser le calcul entre de nombreuses unités de calculs, ce qui signifie que la méthode SPH est également adaptée au calcul parallèle et qu'elle aussi est scalable.



6.3.1.2 Utilisation de la mémoire

L'utilisation de la mémoire est un aspect crucial dans les deux méthodes.

La méthode SPH doit stocker un grand nombre de particules possédant chacune des caractéristiques telles que sa position et sa vitesse. La méthode LBM doit stocker pour chaque noeud du maillage plusieurs distributions de vitesse.

Ainsi, l'aspect de l'utilisation de mémoire est un défi dans les deux méthodes et doit être optimisé afin d'obtenir des codes efficaces. Effectivement, si l'utilisation de la mémoire n'est pas optimisée, il est possible que des simulations à haute résolution dépassent la capacité de mémoire de la machine sur laquelle elles s'exécutent.

Mais pour les deux codes proposés, l'utilisation de la mémoire est correctement gérée.

6.3.2 Technologies utilisées

Les deux implémentations des méthodes LBM et SPH sont basées sur du C++, mais elles diffèrent quant à l'utilisation des technologies.

La méthode LBM utilise la librairie OpenCL alors que la méthode SPH utilise la librairie CUDA de Nvidia. Cependant, d'après le travail [14] du Dr Moritz Lehmann, les deux librairies sont aussi rapides l'une que l'autre sur GPU Nvidia, si OpenCL est correctement utilisé.

Cela signifie donc que FluidX3D possède l'avantage, comparé au code de GVDB-Voxel, de pouvoir tourner sur tous les GPUs, et d'être aussi rapide sur GPU Nvidia que s'il avait été implémenté en CUDA.

Donc de ce côté, il y a des différences, mais les deux technologies s'équivalent.

La méthode SPH est implantée au moyen de la technologie Nvidia GVDB-Voxel. Elle utilisait OptiX pour le raytracing, qui a été supprimé en faveur du raytracing intégré de CUDA en raison de la difficulté à trouver la bonne librairie pour faire tourner le code.

6.3.2.1 GVDB-Voxel

La technologie GVDB-Voxel a été développée vers 2018 pour le calcul, la gestion, la simulation et le rendu de données volumétriques éparses à grande échelle sur des GPUs Nvidia. Elle est uniquement dépendante de CUDA.

Les données volumétriques éparses sont des données volumétriques, représentant un volume dans l'espace, qui ne sont pas uniformément denses dans l'espace, ce qui signifie qu'il peut y avoir des régions avec beaucoup de données et des régions avec peu de données.

Basée sur la technologie OpenVDB, GVDB-Voxel tente de représenter les données volumétriques éparses d'une manière efficace.

Pour cela, la technologie est basée sur une structure de grille hiérarchique.

6.3.2.1.1 Grille hiérarchique

La structure de la grille hiérarchique est donnée à l'initialisation du programme. Elle déterminera le nombre total de voxels qui pourra être utilisé.

La grille est composée de :

- voxels : ce sont les plus petites unités de données volumétriques. Cela correspond à un pixel, mais en 3 dimensions.
- bricks ou blocs : ce sont des collections de voxels. On les appelle bricks ou blocs car ce sont des petits cubes de voxels, généralement de taille fixe. Les bricks rendent l'accès plus facile et plus rapide aux voxels, ce qui permet une meilleure gestion des données.
- Nodes ou noeuds : ce sont des pointeurs vers d'autres noeuds ou vers des bricks. Ils sont utilisés afin d'organiser les bricks d'une manière hiérarchique. Il peut y avoir plusieurs niveaux de noeuds, ce qui permet de diviser l'espace volumétrique en régions aussi petites que l'on souhaite.

Ces composants sont illustrés dans la figure 6.1 pris de la documentation de GVDB-Voxel [5] avec en bleu les voxels, en vert les bricks et en rouge les nodes.



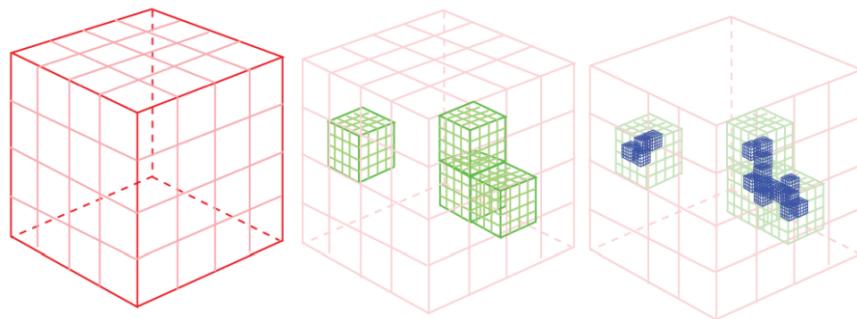


Figure 6.1: Grille hiérarchique [5]

L'implémentation concrète de cette hiérarchie peut se faire en liste de noeuds possédant une liste d'enfants qui pointent soit vers des bricks, soit vers d'autres noeuds, et ainsi de suite, comme le montre la figure 6.6.

L'objectif est maintenant de stocker toutes ces données d'une manière efficace dans la mémoire du gpu afin d'avoir des accès rapides aux données, ce qui est crucial lorsque l'on souhaite obtenir des performances optimales car les accès à la mémoire sont très coûteux.

Pour ce faire, la technologie GVDB-Voxel utilise des atlases, qui sont des structures de données créées afin d'optimiser le stockage et l'accès aux bricks.

Un atlas est donc composé de bricks qui sont dynamiquement allouées lors de l'exécution. Il possède une taille maximale déterminée à la compilation et un type de données qu'il peut stocker. Les bricks sont indexés en fonction de leurs coordonnées dans l'espace, ce qui permet un accès direct et rapide aux données. Par exemple, si un voxel possédant des coordonnées données est recherché, il est possible de trouver directement l'index de l'atlas dans lequel le voxel se trouve grâce à un masque.

Comme le montre la figure 6.5, un atlas stocke les bricks en mémoire d'une manière contigüe, ce qui rend les données facilement gérables et accessibles et les transferts de données plus faciles et rapides, par exemple entre le CPU et le GPU lors de calculs.

De plus, lorsque des bricks sont désallouées, l'atlas peut directement réutiliser l'espace laissé vide pour d'autres bricks, ce qui optimise la quantité de mémoire utilisée.

Comme le montre la figure 6.2, l'atlas ne stocke pas seulement les bricks, mais également les apron voxels qui sont les voxels voisins de la brick stockée afin d'éviter les communications entre les unités computationnelles lors d'un calcul parallèle nécessitant des calculs de voisinage, car les données dont ils ont besoin se trouvent dans les apron voxels.

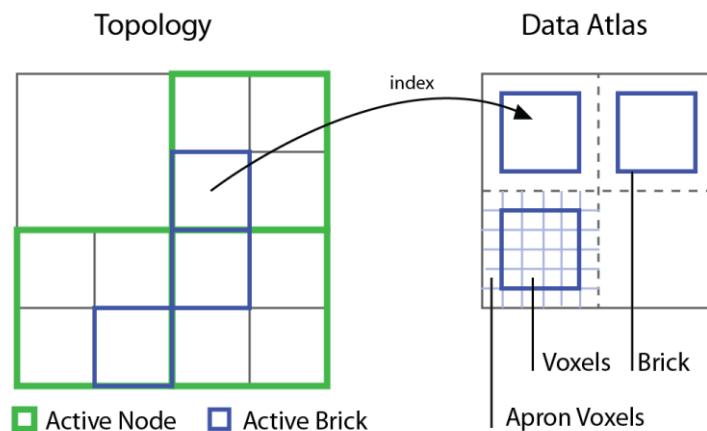


Figure 6.2: Atlas et stockage des bricks [5]

Ainsi, peu de communications entre les unités de calcul sont nécessaires, mais peu de données sont stockées, à la différence des données volumétriques denses qui permettent un calcul rapide avec accès facile aux

voisins d'un voxel, mais qui n'optimisent pas du tout la quantité de mémoire utilisée, comme le montre la figure 6.3.

Dense Computation	Sparse Computation
0 2 1 0 0 0 0 0 4 3 5 2 0 0 0 0 1 6 3 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	
	0 0 2 1 0 4 3 5 2 0 0 1 6 3 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0

Figure 6.3: Différence entre donnée volumétrique éparse et dense lors d'un calcul [5]

Les atlas peuvent être utilisés pour stocker différentes informations, telles que les couleurs ou la densité, comme le montre la figure 6.4.

Ainsi, l'accès aux informations est rapide et facile. Par exemple, si un besoin de connaître la densité de telle région du volume se présente, il suffit de chercher dans l'atlas correspondant au canal densité, l'index obtenu par l'application d'un masque sur les coordonnées de la région donnée. Toute la coordonnée n'est effectivement pas nécessaire pour localiser la brick, sinon il n'y aurait aucune utilité à regrouper les voxels en bricks.

En résumé, un atlas est un espace de stockage de bricks gérant efficacement la mémoire, facilitant l'accès aux données et permettant d'éviter des communications entre les unités computationnelles lors de calculs nécessitant les informations de voisinage.

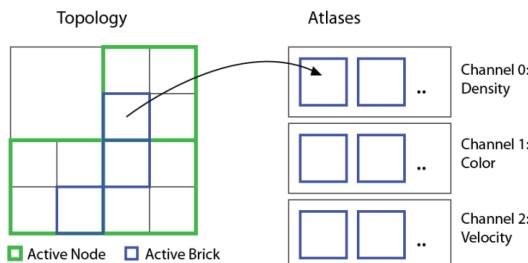


Figure 6.4: Multiples atlases pour stocker des canaux [5]

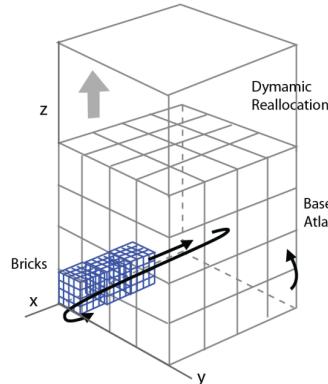


Figure 6.5: Schéma représentant un atlas

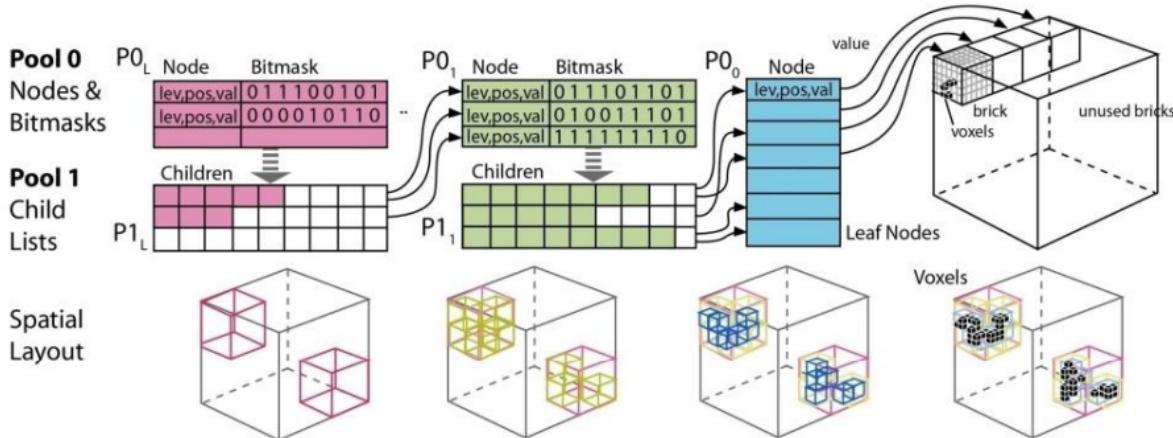


Figure 6.6: Représentation de l'implémentation de la structure de grille hiérarchique



Chapitre 7

Comparaison entre les résultats

Dans ce chapitre, une comparaison entre les deux codes est proposée. Afin de faire un petit rappel, on a comme code :

- GVDB-Voxel : ce code est une implémentation de la méthode SPH en tirant profit des technologies de Nvidia.
- FluidX3D : ce code est une implémentation de la méthode LBM en utilisant OpenCL, ce qui rend le code exécutable sur tous les GPUs.

La comparaison a donc impliqué d'essayer de faire des exemples similaires afin de pouvoir comparer au mieux les deux implémentations des méthodes.

La stabilité numérique des deux méthodes SPH et LBM repose principalement sur l'initialisation de celles-ci, c'est pourquoi la recherche des paramètres rendant les deux méthodes identiques est un problème très complexe.

7.1 Initialisation de la simulation

La condition initiale joue un rôle crucial dans la comparaison des deux codes car l'objectif est de comparer les deux codes grâce à la modélisation du même phénomène physique. La première idée était de modéliser une goutte, en forme de cube car plus facile à définir, tombant dans un bassin d'eau, comme il est possible de voir sur la figure 7.1.

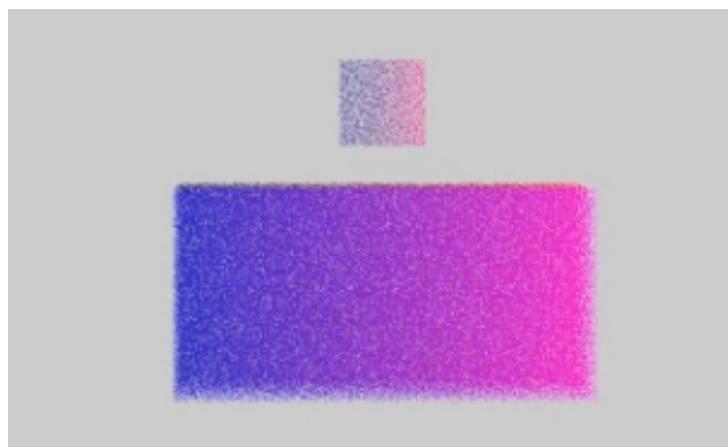


Figure 7.1: Idée initiale

À cet exemple, le travail a montré que la définition d'un bac d'eau était presque impossible dans l'implémentation de la méthode SPH, car celle-ci possède des instabilités au niveau des bords du domaine, c'est pourquoi le fluide implosait ou s'éparpillait en volant dans tout le domaine, comme il est possible de voir sur la figure 7.2. En plus du phénomène d'implosion, le code s'arrêtait au bout d'un petit moment à cause d'accès illégaux à la mémoire.



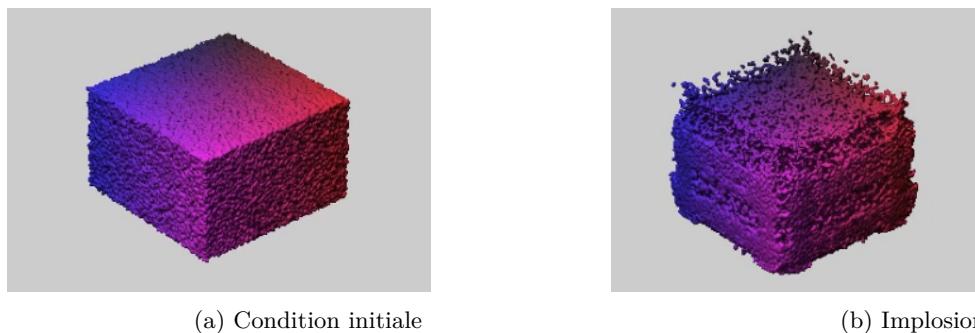


Figure 7.2: Difficulté de définir un bac d'eau

Face à ces difficultés, la solution finale a été de renoncer à cette comparaison qui aurait été idéale car elle aurait permis de faire varier la quantité d'eau dans le bac, permettant de voir à quel point le code avec domaine adaptatif était avantageux comparé à l'autre code qui aurait eu plus de peine à tourner pour un bac très rempli d'eau car il aurait dû calculer ce qui se passe au fond du bac, ce qui n'aurait pas été le cas du code avec domaine adaptatif.

C'est pourquoi l'exemple choisi est un exemple fonctionnel modifié de la méthode SPH. Dans l'exemple original, il y avait ensuite une force fréquentielle qui créait des vagues dans le bac, mais celle-ci a été supprimée afin de pouvoir avoir le même exemple dans les deux codes.

Il s'agit d'un cuboïde d'eau tombant dans un bac, comme il est possible de voir sur la séquence d'images [7.3](#). Cet exemple a été reproduit dans les deux codes, c'est pourquoi la séquence d'images [7.3](#) est celle de FluidX3D.

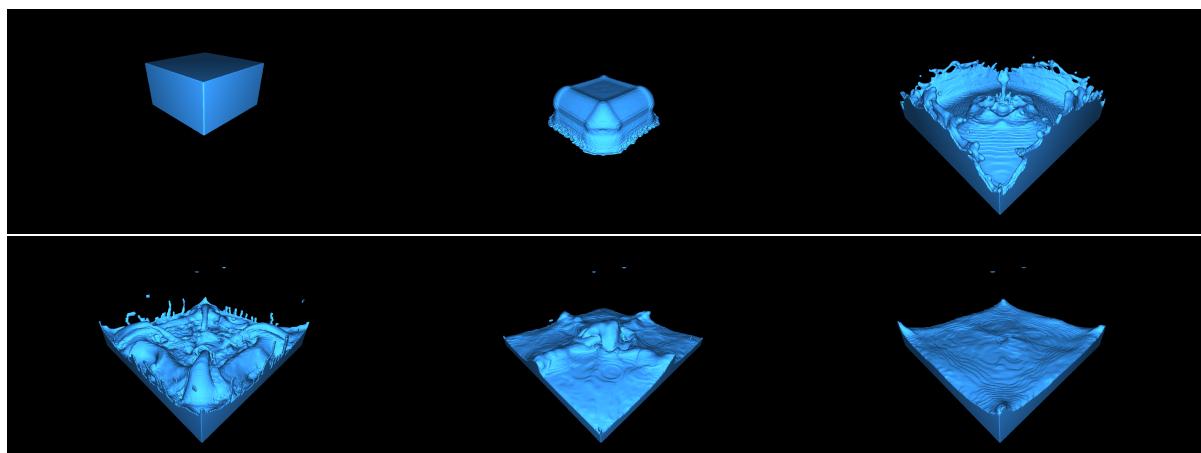


Figure 7.3: Séquence d'images de la simulation sans raytracing

Le raytracing a été désactivé pour toutes les images de FluidX3D car le rendu dans le rapport ne permet pas de bien voir le fluide, comme le représente la figure [7.4](#).

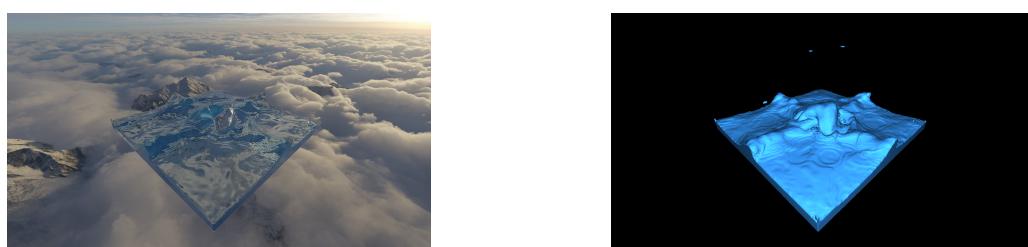


Figure 7.4: Comparaison de rendu avec et sans raytracing

Comme le code GVDB est conçu pour modéliser des simulations à grande échelle comme l'océan par exemple et que le code de FluidX3D est plus dans le domaine du mètre, les deux exemples ne sont

théoriquement pas identiques, c'est pourquoi les paramètres ont été définis afin que les deux codes donnent visuellement les mêmes résultats.

Ainsi, ce ne sera pas une comparaison quantitative, mais qualitative qui sera faite.

Il est possible de voir sur la figure 7.5 3 résolutions différentes pour FluidX3D et une résolution pour GVDB-Voxel.

Pour chacune des résolutions de FluidX3D, le paramètre de tension de surface a été ajusté afin d'avoir un résultat qualitativement similaire à GVDB-Voxel.

Afin de faciliter la prise de décision, un rendu très basique a été effectué sur FluidX3D en n'utilisant que de la rastérisation et non du raytracing.

Comme la figure 7.5 montre, la perspective n'est pas présente dans GVDB-Voxel, à la différence de FluidX3D.

De plus, en comparant les résultats visuels de la figure 7.2 et de la figure 7.5, il apparaît que l'isosurface est calculée dans le cas de FluidX3D, mais pas dans le cas de GVDB-Voxel, l'isosurface étant ce qui permet de passer d'une représentation discrète du fluide comme un ensemble de particules à une représentation lisse.

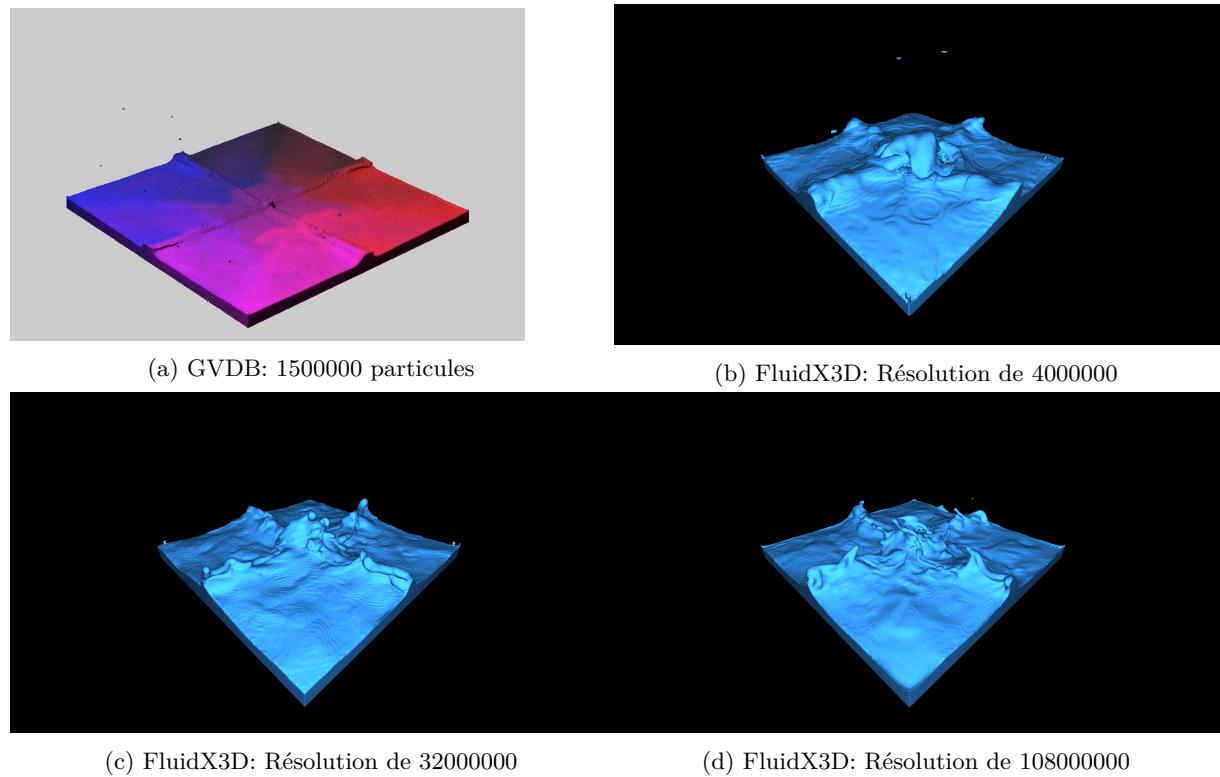


Figure 7.5: Comparaison des qualités

Sur la figure 7.5, la résolution de FluidX3D semblant équivalente à la résolution de GVDB-Voxel est la résolution de $4 \cdot 10^6$.

En effet, les résolutions de $32 \cdot 10^6$ et $108 \cdot 10^6$ donnent plus de détails que GVDB-Voxel quant à la crête des vagues.

Ainsi, ce sera la résolution de $4 \cdot 10^6$ qui sera utilisée afin de comparer les deux codes.

Les tailles des domaines ont été choisies afin d'obtenir un résultat similaire.

Dans le cas de GVDB-Voxel, le domaine est de taille $400 \times 400 \times 200$ tandis que dans le cas de FluidX3D, le domaine est de taille $200 \times 200 \times 100$.

Ainsi, les deux domaines sont proportionnels, mais pas identiques car la résolution de FluidX3D est contrôlée par la taille du domaine.

Comme le code de GVDB-Voxel possède $1.5 \cdot 10^6$ particules, les propriétés de celles-ci telles que leur position, leur vitesse, leur masse etc. doivent être stockées.

Au contraire, dans le code de FluidX3D, comme le domaine est de taille $200 \times 200 \times 100$, la résolution est de $200 \cdot 200 \cdot 100 = 4 \cdot 10^6$ donnant les informations de $4 \cdot 10^6$ lattices à stocker. Le code de FluidX3D tourne en D3Q19 [4], ce qui signifie que la discréttisation de la vélocité donne 19 valeurs à stocker. Donc pour chaque lattice, au moins 19 valeurs sont à stocker ne serait-ce que pour la vélocité. Ainsi, le code de FluidX3D devrait utiliser plus de mémoire que le code de GVDB-Voxel.

Pour la comparaison des deux méthodes, comme le code de GVDB-Voxel utilise du raytracing natif CUDA s'apparentant à de la rastérisation, le code de FluidX3D a été évalué avec et sans raytracing.

7.1.1 Moments clés

Lors de la simulation, 2 moments clés ont été définis. Le premier moment clé est utilisé afin d'ajuster la viscosité pour avoir un résultat similaire entre FluidX3D et GVDB-Voxel, et le deuxième moment clé indique la fin de la simulation, comme il est possible de voir sur la figure 7.6.

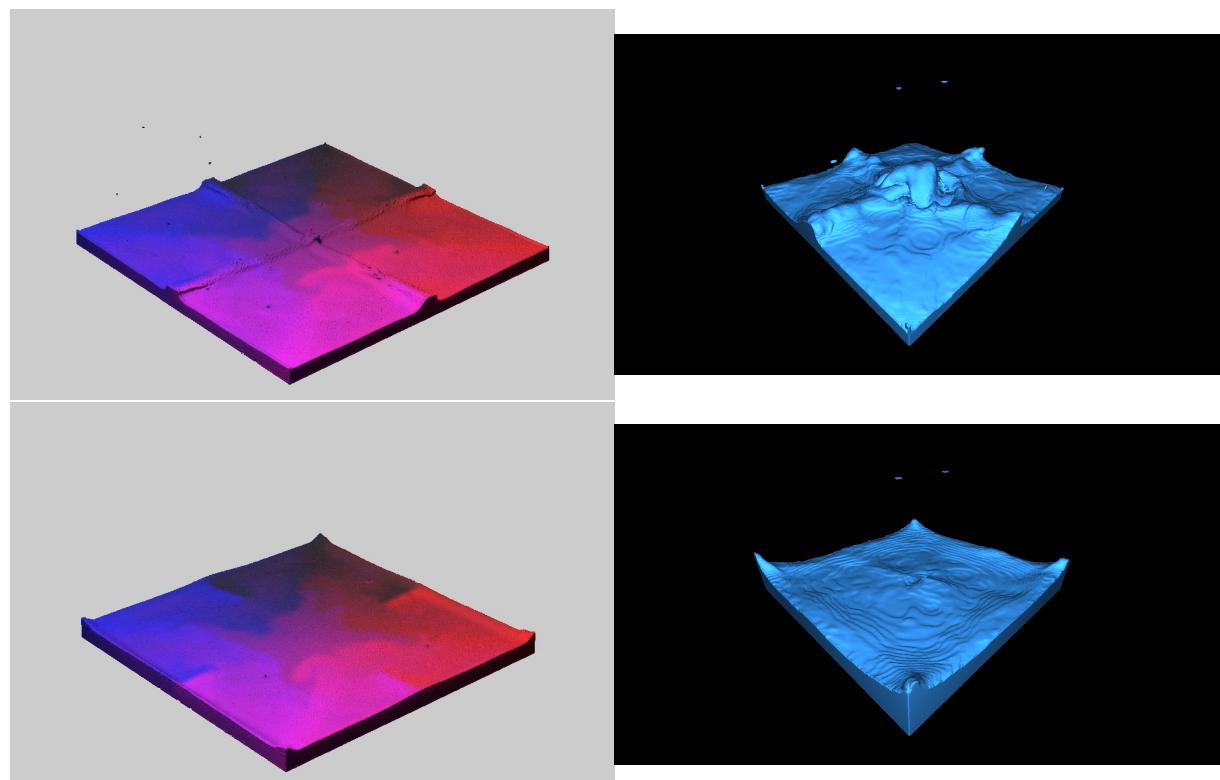


Figure 7.6: Moments clés

Sur la figure 7.6, il est possible de remarquer que le volume d'eau n'est pas le même dans le code de GVDB que dans le code de FluidX3D. En effet, le fluide s'écrase et se compresse systématiquement sur GVDB-Voxel, comme montré sur la figure 7.7.

Afin de résoudre le phénomène de compression, un jeu sur de nombreux paramètres du code de GVDB-Voxel, tels que la taille des particules, l'espacement, la densité etc. a été effectué, mais sans succès.

7.2 Exécution des codes

Dans cette partie, l'objet d'étude sera l'exécution des deux codes.

Les deux codes donnent une visualisation en temps réel, c'est à dire que le rendu est exécuté en même temps que le calcul de la simulation.

La machine ayant servi à l'exécution des deux codes est composée d'un processeur Ryzen 9 7950X3D, d'une carte graphique Nvidia RTX 4080 et de 16 Go de mémoire vive.



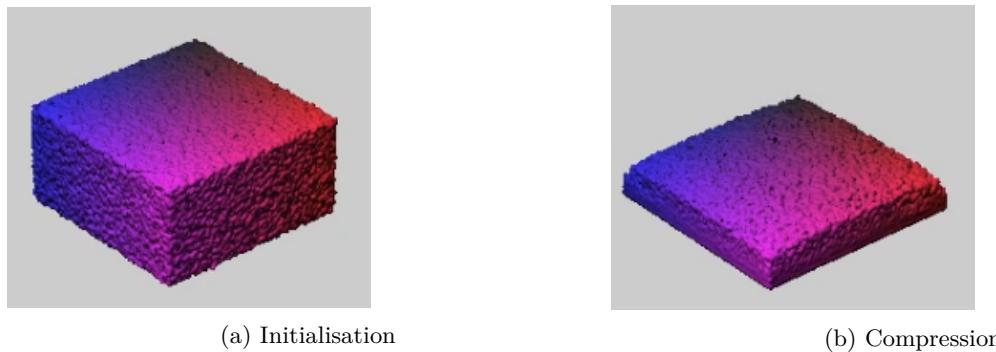


Figure 7.7: Phénomène de compression dans GVDB

Afin d'évaluer les performances des deux codes, un script bash a été créé pour reporter l'utilisation du CPU, de la RAM, et du GPU dans un fichier `csv`.

À cet instant du travail, un souci s'est présenté : le code de FluidX3D ne fonctionne pas en visualisation en temps réel sur le linux de nom ordinateur. En effet, des erreurs XrandR sont apparues lors de l'exécution du code, erreurs qui sont restées irrésolues faute de temps et de documentation sur la provenance de ces erreurs. Mes suppositions à l'heure actuelle sont que Nvidia utilise X11 avec Xinemara qui est une autre version de XrandR, rendant l'affichage incompatible avec mon ordinateur linux. La solution n'étant pas trouvée, l'enregistrement des performances a été effectué sous Windows pour le code de FluidX3D, ce qui ne devait pas être trop problématique étant donné que les données principales qui nous intéressent, à savoir l'utilisation du GPU, se prennent avec `nvidia-smi` sur linux et Windows. Cependant, il a fallu traduire le script bash en script powershell, ce qui s'est fait avec l'aide de ChatGPT et des discussions sur les forums et les blogs.

Enfin, la visualisation des données a été faite à l'aide de python et de ChatGPT qui a donné le squelette du code, permettant d'économiser du temps de codage au profit du rapport.

Les résultats obtenus sont alors donnés sur les figures 7.8, 7.9a et 7.9b.

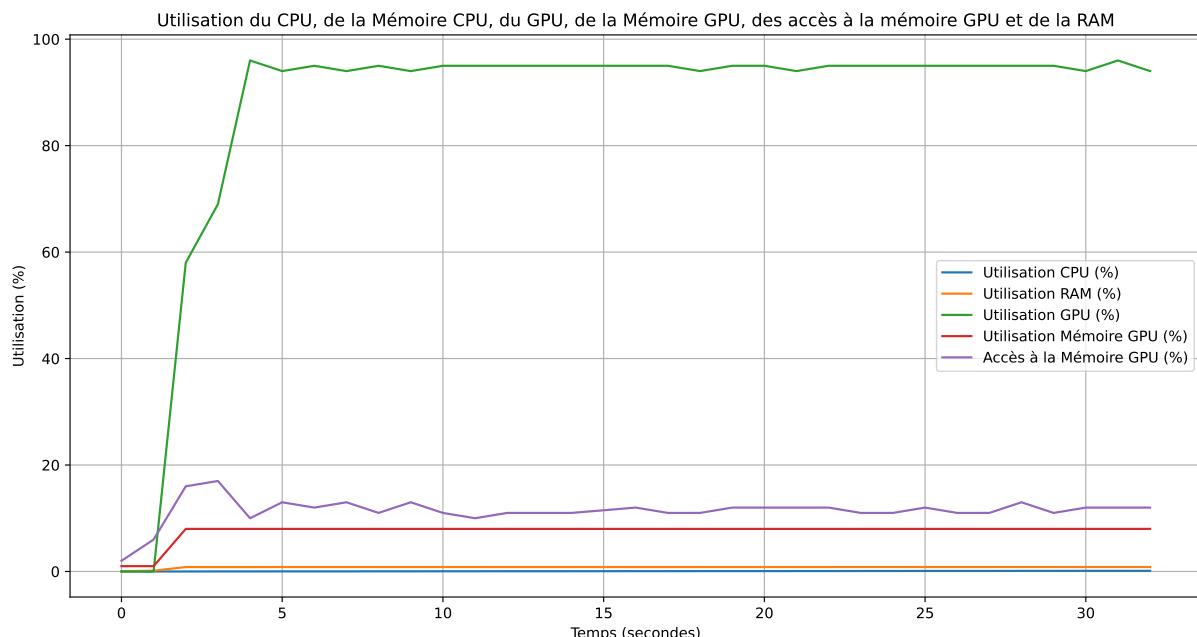


Figure 7.8: GVDB Voxel 1500000 particules

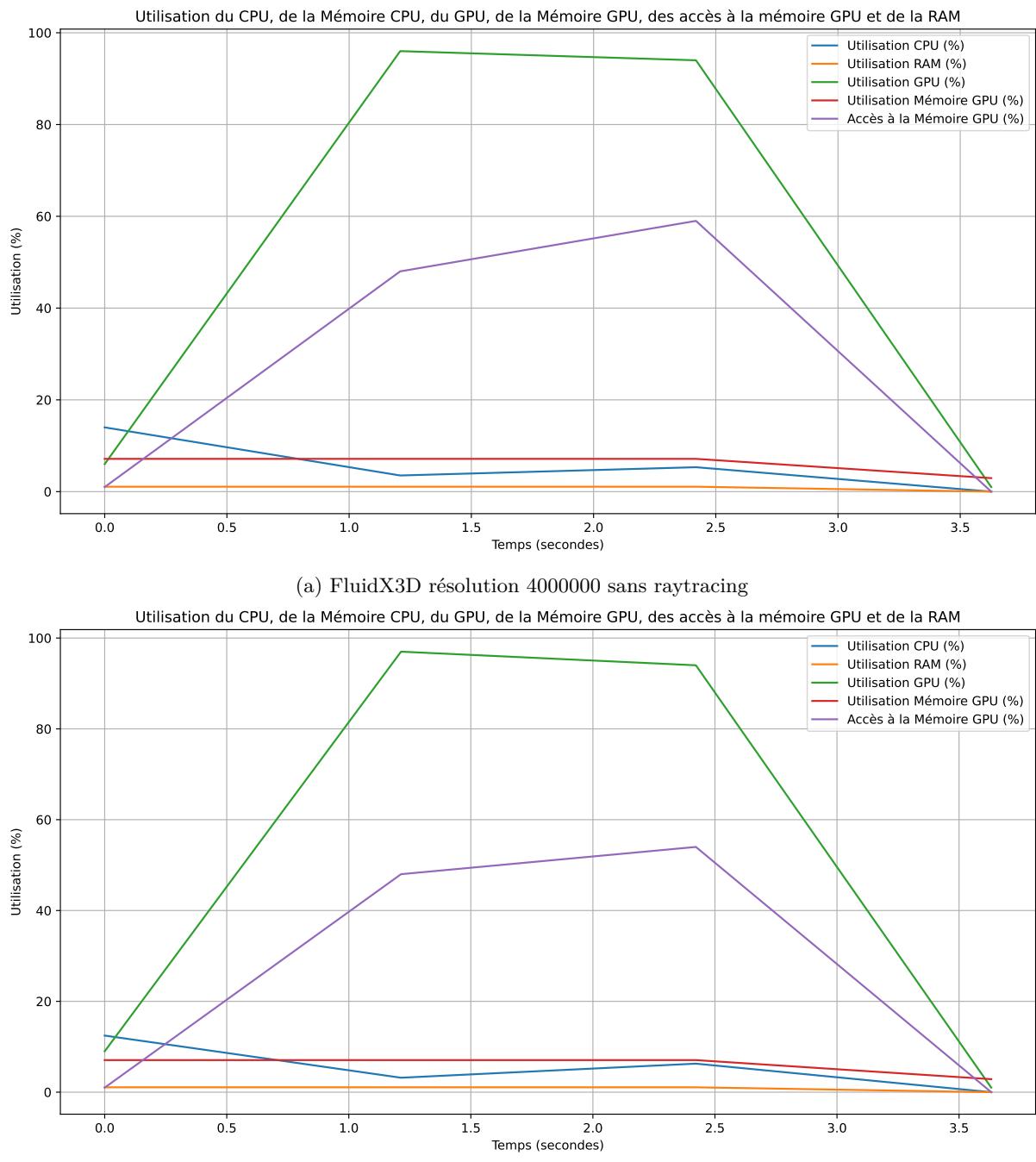


Figure 7.9: Résultats obtenus pour FluidX3D

7.3 Interprétation des résultats

Il est possible d'observer à la fin du graphique de la figure 7.9a que toutes les valeurs diminuent soudainement. Cela est causé par un signal d'arrêt envoyé au programme entre l'enregistrement de 2 mesures, donnant une valeur mauvaise car la mesure utilise le PID du processus en cours d'exécution, qui est détruit par le signal.

La première observation, qu'il est possible de faire sur les deux graphiques obtenus dans la figure 7.9, est que le temps d'exécution des deux codes diffère d'un facteur 10. En effet, le code de FluidX3D est exécuté en approximativement 3 secondes alors que le code de GVDB-Voxel est exécuté en environ 30 secondes.

Cette différence est cruciale et semble indiquer clairement quel code est le plus efficace.

Cependant, un grand nombre de données ont été fournies par les scripts d'évaluation de performance, c'est pourquoi une étude plus en détail va être effectuée.

7.3.1 Utilisation du CPU et de la RAM

Les graphiques de la figure 7.9 donnent de nombreuses informations intéressantes, notamment le pourcentage d'utilisation du CPU ou processeur et de la RAM ou mémoire vive.

Une première constatation est alors que le code de GVDB-Voxel n'utilise pas du tout le CPU, à la différence de FluidX3D. Ainsi, le code de GVDB-Voxel s'exécute entièrement sur GPU ou carte graphique.

Cependant, le code FluidX3D n'utilise que très peu le CPU car son utilisation est inférieur à 20 %. Il se sert du CPU surtout au début du lancement du code ou la valeur est plus élevée, comme la figure 7.9a le montre. Donc le code de FluidX3D s'exécute presque entièrement sur GPU.

Comme l'utilisation de la RAM est avoisinant les 1 % pour les deux codes, on peut considérer l'utilisation de celle-ci comme étant nulle.

7.3.2 Utilisation du GPU

Afin de caractériser l'utilisation du GPU, 3 valeurs ont été retenues :

- Le pourcentage de mémoire GPU utilisée par le processus.
- Le pourcentage de puissance de calcul du GPU utilisée par le processus.
- Le pourcentage d'accès à la mémoire du GPU.

Comme mentionné précédemment, étant donné le nombre de données à stocker dans les deux codes, on s'attend à avoir le code de FluidX3D utilisant plus de mémoire GPU que le code de GVDB-Voxel. Cependant, il n'en est rien car les deux codes utilisent environ 8 % de la mémoire du GPU.

De plus, les deux codes exploitent toute la puissance du GPU car ils sont tous les deux à 95 % d'utilisation de la puissance du GPU, comme semblent le montrer les graphiques de la figure 7.9.

Quant au pourcentage d'accès à la mémoire, le code de FluidX3D est à 50% alors que le code de GVDB-Voxel est à moins de 20%, comme les graphiques 7.9a et 7.8 le représentent.

Étant donné que la même quantité de mémoire est utilisée, une explication serait que FluidX3D solliciterait beaucoup plus la mémoire car, comme il calcule plus rapidement les prochaines étapes de la simulation, il a également plus rapidement besoin de récupérer les étapes calculées précédemment et stockées en mémoire. Ainsi, si le code de GVDB-Voxel mettait le même temps d'exécution que le code de FluidX3D, les accès à la mémoire ne seraient pas répartis sur 30 secondes ce qui ferait un pourcentage d'accès à la mémoire plus élevé, bien que grâce à la technologie GVDB 6.3.2.1, il pourrait cependant avoir un pourcentage d'accès à la mémoire moins grand que FluidX3D.

Comme le code de GVDB-Voxel possède un pourcentage d'accès à la mémoire moins grand que FluidX3D et un temps d'exécution 10 fois plus élevé que le temps d'exécution de FluidX3D, cela signifie que les étapes de calcul du comportement du fluide prennent plus de temps dans l'implémentation GVDB-Voxel de la méthode SPH comparé à l'implémentation FluidX3D de la méthode LBM. En effet, les accès à la mémoire sont l'élément le plus coûteux en temps lors de l'exécution d'un code.

De plus, la figure 7.9b montre les performances obtenues pour le code de FluidX3D avec raytracing. Les performances observées sont identiques aux performances observées sans raytracing.



Ainsi, le code de GVDB-Voxel semble moins bien optimisé que le code de FluidX3D qui donne des performances remarquables. Cela peut être dû grandement aux améliorations et à l'optimisation des technologies qui a seulement pu profiter au code de FluidX3D et non de GVDB-Voxel qui n'a pas été mis à jour depuis 2018, soit depuis 6 ans. La différence observée peut également être due soit au choix de la méthode, la méthode LBM étant peut-être objectivement plus rapide que la méthode SPH, soit à l'implémentation qui dans le cas de FluidX3D reçoit régulièrement des mises à jour, des optimisations ou encore des ajouts de fonctionnalités tandis que dans le cas de GVDB-Voxel, aucune mise à jour n'est faite, ce qui peut signifier que soit le code est parfait, ce qui serait étonnant vu les difficultés rencontrées à l'initialisation de la méthode SPH et vu le peu de documentation expliquant les paramètres utilisés dans le code, soit le code est certes un bon code, mais pas forcément très optimisé ni sans erreurs.



Chapitre 8

Conclusion

8.1 Résumé des comparaisons

Le résumé des comparaisons se trouve dans le tableau 8.1.

Table 8.1: Tableau récapitulatif

	SPH	LBM
Approche	Computations directes des équations de Navier-Stokes	Utilisation de l'équation de Boltzmann pour résoudre les équations de Navier-Stokes
Idée	Représenter le fluide comme un ensemble de particules	Représenter le fluide comme des groupes de particules
Physique	Déterministique	Probabilistique
Nombre de paramètres	Normal	Plus nombreux
Écoulements haute vitesse/incompressible	Oui	Oui si modifications
Fluides non-Newtoniens	Oui si modifications	Oui
Maillage	Non	Oui
Domaine	Adaptatif	Fixe
Géométrie complexe	Oui	Oui
Conditions aux limites	Difficile	Difficile pour avoir de bons résultats
Parallélisable	Oui	Oui
Scalable	Oui	Oui
Maintenance	Il y a 6 ans	Régulière
Implémentation	GVDB	FluidX3D
Échelle	Grande	Petite



	SPH	LBM
Langage	C++	C++
Technologie	CUDA et GVDB-Voxel	OpenCL
Système d'exploitation pour la comparaison	Linux	Windows 10
Raytracing	Natif CUDA	Oui
Temps d'exécution	30 secondes	3 secondes
Utilisation CPU	Non	Un peu
Utilisation RAM	Identique	Identique
Utilisation Mémoire GPU	Identique	Identique
Utilisation GPU	Identique	Identique
Accès à la mémoire GPU	Peu	Beaucoup

8.2 Conclusion

Après avoir regardé le fonctionnement des méthodes LBM et SPH, une comparaison entre deux implémentations de ces deux méthodes a été effectuée. Étant donné la difficulté de définir les mêmes conditions physiques, seule une comparaison qualitative basée sur le rendu visuel donné par les deux méthodes était envisageable. En effet, le code de GVDB-Voxel ne possédait que très peu de documentation et n'avait pas été maintenu depuis 2018. Afin d'évaluer les performances, des scripts bash et powershell ont été développés pour enregistrer différentes données dans un fichier csv et l'affichage de ces données a été effectué avec l'aide de python.

La comparaison a alors donné comme résultat que le code de FluidX3D est plus rapide que le code de GVDB-Voxel d'un facteur 10. Cette différence est non négligeable et montre que l'approche consistant à utiliser la méthode LBM est plus rapide que l'approche employant la méthode SPH. Cependant, la différence est causée par les implémentations et non par les méthodes en elles-mêmes, dans le sens où, dans le cas de FluidX3D, le code est continuellement en développement, en amélioration et en optimisation alors que dans le cas de GVDB, le code n'est plus maintenu depuis 6 ans, ce qui le rend moins performant car il ne profite pas des optimisations des librairies qui ont été faites depuis.

Du fait de sa capacité à être hautement parallélisable, notamment sur GPU, la méthode LBM suscite beaucoup d'intérêt de nos jours, ce qui peut se remarquer justement par l'implémentation et la maintenance active du code de FluidX3D.

Le fait que le code de GVDB n'ait pas été maintenu indique cependant que la technologie GVDB de Nvidia semble actuellement délaissée.

L'implémentation FluidX3D est donc plus rapide et mieux optimisée que l'implémentation GVDB-Voxel et pourrait être utilisée comme référence en terme de performances, étant donné les bons résultats obtenus.

Cependant, nous pouvons nous demander s'il y a un moyen de faire mieux que l'implémentation de FluidX3D et si la technologie NeuralVDB en cours de développement de Nvidia pourrait permettre un gain de performances comparé à l'implémentation FluidX3D. Une étude sur ce sujet serait tout à fait intéressante. Et sur un autre plan, nous pourrions également nous intéresser à la visualisation en temps réel des simulations de fluides appliquée aux jeux vidéos en quête de réalisme.



8.3 Remerciements

Je remercie tout particulièrement mon professeur encadrant Jonas Lätt qui m'a conseillé et guidé tout au long de cette belle découverte de l'univers de la simulation des fluides. Je remercie également ma mère qui a aidé à la relecture du projet, mon père qui m'a donné des conseils quant à la mécanique des fluides et à la rédaction d'un rapport, et toute ma famille pour leur patience et leur soutien.

8.4 Annexe

- Vidéo présentant les résultats visuels des codes de FluidX3D et de GVDB-Voxel.
- Code officiel de GVDB: <https://github.com/NVIDIA/gvdb-voxels>
- Code officiel de FluidX3D: <https://github.com/ProjectPhysX/FluidX3D>



Bibliographie

- [1] P.L. BHATNAGAR, E.P. GROSS et M. KROOK. “A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems”. In : *Physical Review* 94 (1954), p. 511-525.
- [2] Fabien CALEYRON. “Simulation numérique par la méthode SPH de fuites de fluide consécutives à la déchirure d'un réservoir sous impact”. Français. NNT : 2011ISAL0103. tel-00711040. Autre. INSA de Lyon, 2011. URL : <https://theses.hal.science/tel-00711040>.
- [3] Sydney CHAPMAN et T.G. COWLING. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. 3rd. Cambridge University Press, 1970.
- [4] S. CHEN et al. “Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics”. In : *Physical Review Letters* 67 (1991), p. 3776-3780.
- [5] NVIDIA CORPORATION. *GVDB Programming Guide*. Version 1.1. 2018. URL : <https://developer.nvidia.com/gvdb>.
- [6] David ENSKOG. “Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen”. Thèse de doct. Universität Uppsala, 1917.
- [7] U. FRISCH, B. HASSLACHER et Y. POMEAU. “Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation”. In : *Physical Review Letters* 56.14 (1986), p. 1505-1508. DOI : [10.1103/PhysRevLett.56.1505](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.1505).
- [8] R.A. GINGOLD et J.J. MONAGHAN. “Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars”. In : *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (1977), p. 375-389.
- [9] J. HARDY, Y. POMEAU et O. de PAZZIS. “Time evolution of a two-dimensional classical lattice system”. In : *Physical Review Letters* 31 (1973), p. 276-279.
- [10] F. HIGUERA et J. JIMENEZ. “Boltzmann approach to lattice gas simulations”. In : *Europhysics Letters* 9 (1989), p. 663-668.
- [11] JLCERCOS. *Figure*. <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=70225405>. Travail personnel, CC BY-SA 4.0. 2018.
- [12] J.M.V.A. KOELMAN. “A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow”. In : *Euro-physics Letters* 15 (1991), p. 603-607.
- [13] Carolin KÖRNER et al. “Lattice Boltzmann Model for Free Surface Flow for Modeling Foaming”. In : *Journal of Statistical Physics* 121 (oct. 2005), p. 179-196. DOI : [10.1007/s10955-005-8879-8](https://doi.org/10.1007/s10955-005-8879-8).
- [14] Moritz LEHMANN et al. “Accuracy and performance of the lattice Boltzmann method with 64-bit, 32-bit, and customized 16-bit number formats”. In : *Physical Review E* 106 (juill. 2022). DOI : [10.1103/PhysRevE.106.015308](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.106.015308).
- [15] L.B. LUCY. “A numerical approach to the testing of the fission hypothesis”. In : *Astronomical Journal* 82 (1977), p. 1013-1024.
- [16] G. McNAMARA et G. ZANETTI. “Use of a Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata”. In : *Physical Review Letters* 61 (1988), p. 2332.
- [17] Liam MOONEY. *Introduction to Containers and Docker*. <https://endjin.com/blog/2022/01/introduction-to-containers-and-docker>. Apprentice Engineer III. Jan. 2022.
- [18] Ulf SCHILLER, Timm KRÜGER et Oliver HENRICH. “Mesoscopic Modelling and Simulation of Soft Matter”. In : *Soft Matter* 14 (nov. 2017). DOI : [10.1039/C7SM01711A](https://doi.org/10.1039/C7SM01711A).
- [19] Alban VERGNAUD. “Améliorations de la précision et de la modélisation de la tension de surface au sein de la méthode SPH, et simulations de cas d'amerrissage d'urgence d'hélicoptères”. Français. ffNNT: 2020ECDN0033ff. fftel-03185147f. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. École centrale de Nantes, 2020.
- [20] Marcus VESTERLUND. “Simulation and Rendering of a Viscous Fluid using Smoothed Particle Hydrodynamics”. Mém. de mast. Unknown, déc. 2004.

