.

Shakibaeinia and Jin [48] developed a technique based on the MPS interaction model in which a WC model replaces the FI one. By doing this, they decrease the necessary computation time. In Ref. [44], the authors extended their previous work by proposing a straightforward model of an immiscible multiphase method. They also employ and investigate different techniques for the viscosity model. In order to address turbulence issues in wave dynamics, they use the Large Eddy Simulation (LES) concept to formulate a sub-particle scale (SPS) turbulence model. The modifications mentioned above are studied and taken into consideration in the present work.

Hori et al. [28] developed a GPU-accelerated version of MPS using CUDA. The authors focused on the search of neighbouring particles and the iterative solution of the linear system generated by the PPE, which generates a considerable computational load. They optimize the neighbouring particles search through a cell grid, in which there is a specific cell for each particle according to the particle's position. To compare accuracy and performance between the CPU and GPU-based codes, they execute 2-dimensional calculations of an elliptical drop evolution and a dam break flow. Finally, the reported speedup achieved is about 3 to 7 times. These speedup rates serve as comparison reference here.

In Ref. [24], the authors focus on reducing the MPS runtime by replacing how the method calculates the particles' pressure. Instead of using a PPE, they implement an equation of state, similar to the work of Shakibaeinia and Jin. It also aims to accelerate it by exploring its parallelization potential through a multi-core CPU, single-node GPU, and a multi-node GPU cluster environment. The authors use a domain subdivision approach to enable a simulation with a higher number of particles. For a 3D dam break test with 700, 000 particles, the OpenMP solution could reach 5.3 times speedup, while the single-node GPU could reach 14.5 times speedup compared to a single-threaded CPU execution. The multi-node GPU with nine processes performs approximately 5.5 times faster than the single-node GPU. The authors claim that the proposed algorithm allows extensive WC-MPS simulations in distributed memory systems with reduced communication overhead. These speedup values are also a comparison reference to this work.

Шакибайния и Джин [48] разработали методику, основанную на модели взаимодействия MPS, в которой модель WC заменяет модель FI. Делая это, они сокращают необходимое время вычислений. В ссылке [44] авторы расширили свою предыдущую работу, предложив простую модель несмешивающегося многофазного метода. Они также используют и исследуют различные методы для модели вязкости. Для решения проблем турбулентности в волновой динамике они используют концепцию моделирования больших вихрей (LES) для разработки модели турбулентности в масштабе субчастиц (SPS). Упомянутые выше модификации изучены и приняты во внимание в настоящей работе.

Хори и др. [28] разработали версию MPS с ускорением GPU с использованием CUDA. Авторы сосредоточились на поиске соседних частиц и итерационном решении линейной системы, генерируемой СИЗ, что создает значительную вычислительную нагрузку. Они оптимизируют поиск соседних частиц по сетке ячеек, в которой для каждой частицы есть определенная ячейка в соответствии с положением частицы. Чтобы сравнить точность и производительность между кодами на базе ЦП и графического процессора, они выполняют двумерные вычисления эволюции эллиптического падения и потока прорыва плотины. Наконец, заявленное ускорение достигнуто примерно в 3-7 раз. Эти показатели ускорения служат здесь в качестве эталона для сравнения.

В ссылке [24] авторы сосредотачиваются на сокращении времени выполнения MPS, заменяя метод расчета давления частиц. Вместо использования СИЗ они реализуют уравнение состояния, аналогичное работе Шакибайнии и Джина[43]. Он также стремится ускорить его, исследуя потенциал распараллеливания с помощью многоядерного процессора, одноузлового графического процессора и кластерной среды с несколькими узлами GPU. Авторы используют подход разделения предметной области, чтобы обеспечить моделирование с большим числом частиц. Для 3D-теста на разрыв плотины с 700 000 частицами решение OpenMP может ускорить работу в 5,3 раза, в то время как графический процессор с одним узлом может ускорить работу в 14,5 раза по сравнению с однопоточным выполнением процессора. Многоузловой графический процессор с девятью процессами работает примерно в 5,5 раза быстрее, чем одноузловой графический процессор. Авторы утверждают, что предложенный алгоритм позволяет проводить обширное моделирование WC-MPS в системах с распределенной памятью с уменьшенными затратами на связь. Эти значения ускорения также являются сравнительной ссылкой на эту работу.

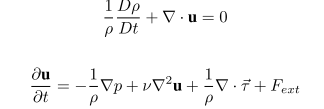
.

Unlike the works here presented, this work not only focuses on applying parallelization to the MPS calculations but also applying it to the added improvements and modifications. This combination of features is unprecedented. Besides, both parallelized versions (OpenMP and CUDA) can achieve speedups regarded to the MPS variations developed. Exemplifying, one set up of features can praise for stability and higher accuracy, while another may seek for higher performance.

**3 The Moving Particle Semi-implicit Method**

The MPS uses discrete elements called particles in which each of them carries a set of physical quantities. Since the fluid flow governing equations are for continuous domains, the continuous differential operators, such as the derivative, gradient, and Laplacian, need to be discretized. The MPS proposes discretized models to these operators. In this section, the method is detailed by showing its governing equations, discretized differential operations, and a set of variations and improvements to the standard MPS.

**3.1 Standard method & Governing equations**

Koshizuka and Oka [8]] models the fluid as a set of interacting particles, in which their motion is determined through the interaction with neighbouring particles and the governing equations of fluid motion. [Equation Tand Equation 2 are the continuity equation and Navier-Stokes equation, respectively, which describe the motion of one viscous fluid flow. 

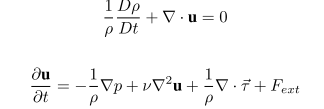
where u is the ﬂuid velocity vector, t is the time, ρ is the ﬂuid density, p is the pressure, ν is the laminar kinematic viscosity, τ is the sub-particle scale (SPS) or turbulence contributed by unresolved small motions (detailed in subsubsection 3.2.2) and F ext represent external forces like gravity.

В отличие от представленных здесь работ, эта работа не только фокусируется на применении распараллеливания к вычислениям MPS, но и применяет его к добавленным улучшениям и модификациям. Такое сочетание функций является беспрецедентным. Кроме того, обе распараллеленные версии (OpenMP и CUDA) могут обеспечить ускорение по сравнению с разработанными вариантами MPS. Например, один набор функций может похвалить за стабильность и более высокую точность, в то время как другой может стремиться к более высокой производительности.

**3 Полунеявный метод движущихся Частиц**

MPS использует дискретные элементы, называемые частицами, в которых каждая из них несет набор физических величин. Поскольку уравнения, управляющие потоком жидкости, предназначены для непрерывных областей, непрерывные дифференциальные операторы, такие как производная, градиент и лапласиан, должны быть дискретизированы. MPS предлагает этим операторам дискретизированные модели. В этом разделе метод подробно описан, показаны его управляющие уравнения, дискретизированные дифференциальные операции и набор вариаций и улучшений стандартного MPS.

**3.1 Стандартный метод и управляющие уравнения**

Кошизука и Ока [8]] моделируют жидкость как набор взаимодействующих частиц, в которых их движение определяется взаимодействием с соседними частицами и управляющими уравнениями движения жидкости. [[Уравнение и уравнение 2 являются уравнением непрерывности и уравнением Навье-Стокса соответственно, которые описывают движение одного потока вязкой жидкости. 

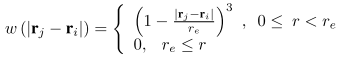
где u - вектор скорости жидкости, t - время, ρ - плотность жидкости, p - давление, ν - ламинарная кинематическая вязкость, τ - масштаб субчастиц (SPS) или турбулентность, обусловленная неразрешенными малыми движениями (подробно описано в подразделе 3.2.2), и F ext представляют внешние силы, такие как гравитация.

В этом методе домен дискретизируется на частицы, как упоминалось выше. Они взаимодействуют со своими соседями через функцию ядра w(r), где r - расстояние между двумя частицами. Больший размер ядра подразумевает взаимодействие с большим количеством частиц. Система, разработанная в этой работе, предоставляет набор функций ядра для выбора между ними.

Однако рекомендуется использовать функцию ядра, предложенную в [45], при запуске приложений (версия FI), как в уравнении 3.



где reis - радиус области взаимодействия, а ri и rj - положения частиц i и j соответственно. При расчете давления с помощью уравнения состояния (версия WC) рекомендуется использовать и функцию ядра, предложенную [43], как в уравнении 4. Эти модели расчета давления рассматриваются далее в этом разделе.



Уравнение 5 определяет n i , плотность числа частиц, в положении частицы r i , которое пропорционально числу соседей i.



Уравнение непрерывности выполняется, если число частиц остается постоянным, и это постоянное значение обозначается n 0 .

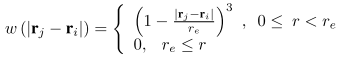
Чтобы идентифицировать частицу со свободной поверхностью, плотность числа частиц i-й частицы просто должна удовлетворять условию, представленному в уравнении 6, поскольку на свободной поверхности плотность числа частиц резко падает. 

In this method, the domain is discretized into particles, as mentioned above. They interact with its neighbours through a kernel function w(r), r being the distance between two particles. A larger kernel size implies in an interaction with more particles. The system developed in this work provides a set of kernel functions to choose between them.

However, it is recommended that the kernel function proposed by [45] should be used when running a PPE (FI version),as in Equation 3.



where r e is the radius of the interaction area and r i and r j are the positions of particles i and j, respectively. When calculating the pressure through an equation of state (WC version), it is recommended to use and the kernel function proposed by [43], as in Equation 4. Those pressure calculation models are addressed further in this section.



Equation 5 deﬁnes n i , the particle number density, at the particle’s position r i , which is proportional to the neighbors number of i.



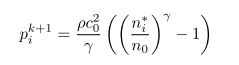
The continuity equation is satisﬁed if the particle number ensity remains constant, and this constant value is denoted by n 0 .

To identify a free-surface particle, the particle number density of the ith particle just needs to satisfy the condition presented in Equation 6 since on the free-surface the particle number density drops abruptly. 

где β является постоянной величиной в диапазоне от 0,8 до 0,99. Чем больше β, тем больше будет число частиц, распознанных как свободная поверхность. Кошизука и Ока [8] рекомендуют установить его равным 0,97, и это значение принято здесь.

Как правило, в методах без сетки существует два основных подхода к расчету давления частиц при моделировании жидкостей: подход со слабой сжимаемостью (WC) и подход с полной несжимаемостью (FI), где каждый из них имеет свои преимущества и недостатки. В этой работе реализованы оба подхода, предоставляя широкий спектр функций, чтобы пользователи могли принимать решения в зависимости от своих потребностей. После получения давления частиц можно вычислить градиент давления, что позволяет вычислять значения скорости для обновления положения частиц с помощью интегрирования Эйлера первого порядка.

**3.1.1 Уравнение состояния**

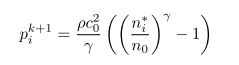
Модель WC уделяет приоритетное внимание производительности, поскольку она значительно снижает вычислительную нагрузку в обмен на численную точность. В работе [43] традиционная модель FI заменяется моделью WC, потому что сборка и решение PPE на каждом шаге занимает значительное количество вычислительного времени: около двух третей каждого временного шага для моделирования с порядком величины 10 3 частиц. Упомянутая работа заменяет PPE явным соотношением, в частности уравнением состояния, описанным в [46] и модифицированным в [47], которое показано ниже. 

где - значение давления частицы i за время k + 1 и типичное значение, используемое для γ = 7. c0 - скорость звука. Это исследование, по сути, показывает уменьшение времени процесса на каждом временном шаге, в то время как характеристики моделирования остаются аналогичными полностью несжимаемому подходу. Авторы называют этот модифицированный MPS WC-MPS. В этой работе используется подход, предложенный [43], из-за его сходства со слабо сжимаемым подходом, принятым в популярном WCSPH [48].

where β is constant between 0.8 and 0.99. The bigger β is, the bigger will be the number of particles recognized as free-surface. Koshizuka and Oka [8] recommend to set it to 0.97, and that is the value adopted here.

Generally, in meshless methods, there are two main approaches to calculate the particles’ pressure when simulatingliquids, the weakly compressible (WC) approach and the fullyincompressible (FI) one, where each one of them has its advantages and disadvantages. This work implements both approaches, providing a wide variety of features so the users can decide based on their needs. After obtaining the particles’ pressure, it is possible to compute the pressure gradient, enabling the calculations of the velocity values to update the particles’ positions through a ﬁrst-order Euler integration.

**3.1.1 Equation of state**

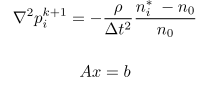
The WC model prioritizes performance since it severely diminishes computational load in exchange for numerical precision. In the work of [43], the traditional FI model is replaced by a WC one because assembling and solving the PPE in each step takes a considerable amount of computation time: about two-thirds of each time step for a simulation with an order of magnitude of 10 3 particles. The mentioned work replaces the PPE by an explicit relation, speciﬁcally an equation of state described by [46] and modiﬁed by [47] that is shown below. 

where is pressure value of particle i in timestep k + 1 and the typical value used for γ = 7. c 0 is the speed of sound. This study, in fact, shows a decrease in process time per time step while the simulation characteristics remains similar to the fully incompressible approach. Authors refer to this modiﬁed MPS as WC-MPS.

This work adopts the approach proposed by [43] due to its similarity to the weakly compressible approach adopted in the popular WCSPH [48].

**3.1.2 Уравнение давления Пуассона**

В отличие от подхода со слабой сжимаемостью, полностью несжимаемая модель вычисляет давление частиц с более высокой точностью, хотя это приводит к высокой вычислительной нагрузке. В этом случае необходимо решить уравнение, показанное в уравнении 8, которое дает линейную систему уравнений типа, показанного в уравнении 9.



где A - разреженная квадратная матрица размером N × N, где N - общее число частиц в моделировании, вектор правого размера (RHS) b размера N хранит исходные термины, а x, также размера N, представляет желаемое давление частиц.

Сборка матрицы коэффициентов A использует дискретизированную модель Лапласа, показанную в уравнении 10.



где ϕ - некоторая физическая величина, λ - средневзвешенное значение квадрата расстояния между частицами i и j (или r2), как показано в [8].

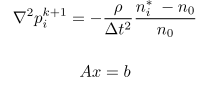
Как упоминалось ранее в подразделе 3.1, в этой работе ICCG используется для решения PPE, как в [8]. Он состоит в подаче матрицы коэффициентов A в неполную факторизацию Холески, которая обычно используется в качестве предварительной подготовки для итерационных численных методов. После этого сопряженный градиент применяется для итеративного решения линейной системы уравнений.

**3.2 Модели потока жидкости**

Улучшение численной стабильности и добавление различных моделей потока жидкости обеспечивают более надежное моделирование в определенных ситуациях. В этом разделе представлен используемый в данной работе набор моделей

**3.1.2 Poisson pressure equation**

As opposed to the weakly compressible approach, the fully incompressible model calculates the particles’ pressure with higher accuracy even though this leads to a high computational load. In this case, it is necessary to solve the quation, shown in Equation 8, which yields a linear system of equations of the type shown in Equation 9.



where A is a sparse square matrix of size N ×N which N is the total particle number in the simulation, the Right-Hand Size (RHS) vector b of size N stores the source terms and x, also of size N, represents the desired pressures of the particles.

The assemble of the coefﬁcient matrix A makes use of the discretized Laplacian model, shown in Equation 10.



where ϕ is some physical quantity, λ is the weighted average of the squared distance between particles i and j (or r 2), as shown in [8].

As previously mentioned in subsection 3.1, this work uses the ICCG to solve the PPE, like in [8]. It consists of submitting the coefﬁcient matrix A into the incomplete Cholesky factorization, which is generally used as preconditioning for iterative numerical methods. Afterwards, the conjugate gradient is applied to solve the linear system of equations iteratively.

**3.2 Fluid ﬂow models**

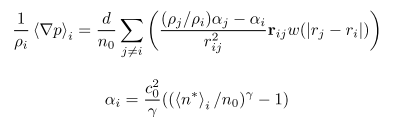
The improvement of numerical stability and the addition of different models of ﬂuid ﬂow enable a more reliable simulation in certain situations. This section presents the used set of models of ﬂuid ﬂows in this work.

**3.2.1 Multiphase ﬂow**

A model that signiﬁcantly increases the number of possible applications for the MPS is the one that supports multidensity ﬂuids interaction, the multiphase ﬂow.

Shakibaeinia and Jin [44] proposed a straightforward multiphase model based on the MPS, in which it treats the system as a multi-density multi-viscosity ﬂuid. The model is only applied to a WC-MPS [43], solving a single set of equations for all phases. In this model, the density differences of particles of different phases are automatically taken care of, since that, when calculating a particle’s velocity, its density appears directly in the equations.

The main issue of this approach arises when dealing with the density discontinuity near the interface between the ﬂuids, which can result in pressure ﬁeld discontinuity. The strategy followed was to use a smoothed value of density hρi i instead of the real particles’ density, set for each particle before starting the simulation. The density of an individual particle is necessary for calculating its pressure. Equation 11 shows the multi-density pressure term in the weakly compressible compressible model applied in this study.



where d refers to the number of dimensions in the simulation and the typical value of γ = 7 is used, as in Tait’s equation of state [49].

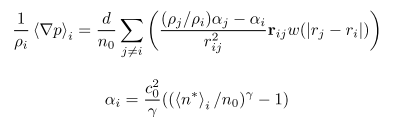
The multiphase model proposed by Shakibaeinia and Jin [44] can only be used by calculating the particles’ pressure through the equation of state, which is the WC approach. Despite that, this work adopts this model for that incompressibility model, given its relative simplicity and stability.

**3.2.1 Многофазный поток**

Модель, которая значительно увеличивает число возможных применений для MPS, - это модель, которая поддерживает взаимодействие жидкостей с различной плотностью, многофазный поток.

Шакибайния и Джин [44] предложили простую многофазную модель, основанную на MPS, в которой система рассматривается как жидкость с различной плотностью и вязкостью. Модель применяется только к WC-MPS [43], решая один набор уравнений для всех фаз. В этой модели автоматически учитываются различия в плотности частиц разных фаз, поскольку при расчете скорости частицы ее плотность появляется непосредственно в уравнениях.

Основная проблема этого подхода возникает при работе с разрывом плотности вблизи границы раздела жидкостей, что может привести к разрыву поля давления. Последовавшая стратегия состояла в том, чтобы использовать сглаженное значение плотности hpi i вместо плотности реальных частиц, установленной для каждой частицы перед началом моделирования. Плотность отдельной частицы необходима для расчета ее давления. Уравнение 11 показываетчлен давления с множественной плотностью в слабо сжимаемой модели, применяемой в этом исследовании.



где d относится к числу измерений в моделировании, и используется типичное значение γ = 7, как в уравнении состояния Тейта [49].

Многофазная модель, предложенная Шакибейнией и Джином [44], может быть использована только для расчета давления частиц с помощью уравнения состояния, которое является подходом WC. Несмотря на это, в данной работе эта модель используется для этой модели несжимаемости, учитывая ее относительную простоту и стабильность.

**3.2.2 Турбулентный поток**

Для расчета влияния термина турбулентности τ, относящегося к неразрешенному термину малого движения в [50], использовалась математическая модель моделирования больших вихрей (LES) для турбулентности [51] [52]. В соответствии с оригинальной концепцией LES, вихрям, которые могут быть разрешены с помощью вычислительной сетки, разрешается развиваться в соответствии с уравнениями Навье-Стокса, и для представления турбулентности в масштабах подсети используется модель (методы на основе сетки). Модель масштаба субчастиц (SPS) была необходима для методов без сетки. Вводя вихревую вязкость турбулентности ν t , неразрешенное напряжение турбулентности SPS τ ij в уравнении 2 можно записать, как показано в уравнении 13.



где δ ij - оператор Кронекера; и S ij - скорость деформации, а k - кинетическая энергия турбулентности, которая может быть включена в член давления при решении уравнения 2 уравнения импульса. Широко используемая модель [51] используется здесь для формулировки вихревой вязкости турбулентности.

**3.3 Численные улучшения**

В этом разделе приведено описание реализованных вариантов MPS. Примечательно, что разнообразие вариантов MPS огромно, и те, которые были выбраны, находятся между уровнем воздействия улучшения и стоимостью внедрения. Эти изменения позволили создать версию, которая считалась достаточно стабильной и физически точной. Также показаны другие модификации стандартного метода, которые расширяют область применения MPS.

**3.3.1 Сохранение импульса**

Простой способ добиться последовательного сохранения линейного импульса - обеспечить лучшую дискретизацию градиентной модели. в разделе 14 показано предлагаемое изменение в формулировке градиента давления, предложенное Хайером и Гото [53].



При применении антисимметричного подсекции 14 линейный импульс сохраняется. Этот метод авторы называют исправленным MPS (MPS).

**3.2.2 Turbulent ﬂow**

To calculate the inﬂuence of the turbulence term τ, referred to the unresolved small motion term in [50], the large eddy simulation (LES) mathematical model for turbulence [51] [52] was employed. According to the original LES conception, eddies capable of being resolved by the computational grid are allowed to evolve according to the Navier-Stokes equations, and a model is employed to represent the turbulence at sub-grid scales (mesh-based techniques). A sub-particle scale (SPS) model was made necessary for meshless methods. By introducing the turbulence eddy viscosity ν t , the unresolved SPS turbulence stress τ ij in Equation 2 can be written as shown in Equation 13.



where δ ij is Kronecker’s operator; and S ij is the strain rate and k is the turbulence kinetic energy, which can be incorporated into the pressure term when solving the momentum equation Equation 2. The widely used model by [51] is employed here to formulate the turbulence eddy viscosity.

**3.3 Numerical improvements**

In this section, there is a description of the implemented MPS variations. It is noteworthy that the universe of MPS variations is vast, and the ones that were selected stand between improvement impact level and implementation cost. These variations allowed a version considered sufﬁciently stable and physically accurate to be achieved. It is also shown other modiﬁcations to the standard method, which expand the range of applications of the MPS.

**3.3.1 Momentum conservation**

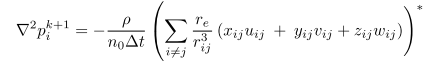
A simple way to achieve consistent conservation of linear momentum is to ensure a better discretization of the gradient model. subsubsection 14 shows the suggested alteration in the pressure gradient formulation by Khayyer and Gotoh [53].



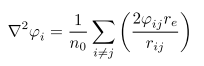
When the anti-symmetric subsubsection 14 is applied, linear momentum is conserved. This method is referred to by the authors as Corrected MPS (CMPS).

**3.3.2 Pressure calculation**

One of the major issues of the MPS, and consequently widely explored, is the spurious pressure oscillation. Works that presented substantial improvements in this area, making few and simple modiﬁcations to the method, have been proposed [15, 35]. The authors call the ﬁrst one the MPS with a Higher order Source term (MPS-HS) since it presents a new formulation for the calculation of the derivative of the particle number density (Dn/Dt ). Using this variation, the Equation 8 is replaced by the Equation 15 [54].



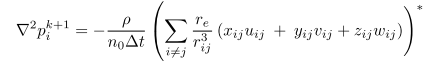
where r ij is the distance between particles i and j. x ij , y ij and z ij represent the distance between particles i and j in each dimension and u ij , v ij and w ij the velocity difference of particles i and j in each dimension. Another improvement to the implemented pressure calculation was the proposition of a higher order Laplacian model for both two and three (Equation 16) dimensional simulations [35, 54].



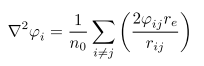
where ϕ is a generic physical quantity. This new derivation was named by the authors as MPS with a Higher order Laplacian of pressure (MPS-HL).

**3.3.2 Расчет давления**

Одной из основных проблем MPS, и, следовательно, широко изученной, является паразитное колебание давления. Были предложены работы, которые представили существенные улучшения в этой области, внеся в метод несколько простых модификаций [15, 35]. Авторы называют первый из них MPS с исходным термином более высокого порядка (MPS-HS), поскольку в нем представлена новая формулировка для расчета производной плотности числа частиц (DN Dt). Используя этот вариант, уравнение 8 заменяется уравнением 15 [54].



где r ij - расстояние между частицами i и j. x ij , y ij и z ij представляют расстояние между частицами i и j в каждом измерении, а u ij, v ij и w ij - разность скоростей частиц i и j в каждом измерении. Еще одним улучшением реализованного расчета давления стало предложение модели Лапласа более высокого порядка как для двух, так и для трехмерного моделирования (уравнение 16) [35, 54].



где ϕ - общая физическая величина. Этот новый вывод был назван авторами как NPS с лапласианом давления более высокого порядка (MAPS-HL).