

Diss. ETH No. 19566

DISCRETIZATION-CORRECTED PSE OPERATORS
FOR ADAPTIVE MULTIREOLUTION PARTICLE
METHODS

A dissertation submitted to
ETH ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
BIRTE SCHRADER
Dipl.-Ing. Maschinenbau, University of Stuttgart
born on August 17, 1979
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
PROF. IVO F. SBALZARINI
PROF. PATRICK JENNY
PROF. GEORGES-HENRI COTTET

2011

ABSTRACT

Mathematical models in the form of differential equations can often not be solved analytically, but need to be simulated by means of a numerical method. Particle methods are mesh-free schemes that use independent or pairwise interacting particles to represent the physical properties of a system. This allows for natural adaptivity in complex or deforming geometries. The Lagrangian frame of reference when tracking the particles during a simulation renders particle methods particularly successful in the area of fluid mechanics. Their numerical stability in advection-dominated problems is superior to that of descriptions in an Eulerian frame of reference.

The general particle strength exchange (PSE) operators [31] approximate derivatives on scattered particle locations to any desired order of accuracy. Convergence, however, is limited by the discretization error resulting from an inherent numerical quadrature.

In this thesis, we introduce a consistent discretization correction framework for PSE operators. With this correction, the operators yield the desired rate of convergence for any resolution, both on uniform Cartesian and irregular particle distributions, as well as near boundaries. The discretization correction allows setting the kernel width to arbitrarily small values for constant interparticle spacing. We show that, on uniform Cartesian particle distributions, this leads to a seamless transition from discretization-corrected (DC) PSE operators to classical finite-difference stencils. We further identify relationships between DC PSE operators and operators used in corrected smoothed particle hydrodynamics, reproducing kernel

particle methods, differential reproducing kernel and moving least squares approximations, and vorticity redistribution schemes. We analyze the presented DC PSE operators with respect to their accuracy, rate of convergence, computational efficiency, numerical dispersion, numerical diffusion, and stability and compare to uncorrected (UC) PSE operators and, when appropriate, to standard finite-difference stencils. Several benchmarks form the basis for a discussion of the operators.

Benchmarking produces an operator assessment that is highly dependent on the problems considered. We therefore introduce three objective, problem-independent measures for the assessment of operator qualities and demonstrate their use in operator choice and deeper understanding of the influence of an operator's parameters on its properties.

Finally, we formulate and test a numerical method for the solution of transport problems that is based on DC PSE operators and that benefits from their strengths. It unites the concepts of Lagrangian particle methods and self-organization of particles driven by particle-particle interactions. Multiresolution requirements are satisfied by means of a monitor function that is used to scale the particle-particle interactions. This, and the advection of the particles, renders the method naturally adaptive. Particle insertions and removals guarantee dynamic adaptation of the local particle densities and therefore the total number of particles. All computations are local, such that the method is well suited for parallelization on distributed-memory machines.

KURZFASSUNG

Mathematische Modelle in Form von Differentialgleichungen können häufig nicht analytisch gelöst werden sondern müssen mit Hilfe numerischer Methoden simuliert werden. Partikelmethode benutzen keine Gitter zur Diskretisierung des Kontinuums, sondern voneinander unabhängige oder paarweise interagierende Partikel um die lokalen physikalischen Systemeigenschaften zu repräsentieren. Dies ermöglicht unter Anderem eine unkomplizierte Anpassung an komplexe oder sich verformende Geometrien. Die Lagrangesche Betrachtungsweise, d.h. das Verfolgen der Partikel während einer Simulation, macht Partikelmethode besonders auf dem Gebiet der Strömungsmechanik attraktiv. In konvektionsdominierten Problemen weisen Partikelmethode eine höhere numerische Stabilität auf als Methoden, die auf der Eulerschen, d.h. ortsgebundenen, Betrachtungsweise basieren. Die allgemeinen *particle strength exchange* (PSE) Operatoren nähern mit beliebiger Genauigkeit Ableitungen von Funktionen an, deren Werte nur auf im Raum verstreuten Punkten (Partikeln) gegeben sind. Die Konsistenzordnung wird jedoch durch einen durch numerische Quadratur entstandenen Diskretisierungsfehler herabgesetzt.

In dieser Dissertation führen wir ein konsistentes System zur Diskretisierungskorrektur von PSE Operatoren ein. Mit Hilfe dieser Korrektur erzielen die Operatoren die gewünschte Konsistenzordnung für alle räumlichen Auflösungen, sowohl auf äquidistanten kartesischen und unregelmässigen Partikelverteilungen als auch in der Nähe von Rändern. Die Diskretisierungskorrektur erlaubt es, bei konstantem Partikelabstand die charakteristische Breite des Kerns der Operatoren beliebig schmal zu wählen. Wir

zeigen, dass dies auf kartesischen Partikelverteilungen zu einem nahtlosen Übergang zwischen *discretization-corrected* (DC) PSE Operatoren und klassischen Differenzenquotienten der Finite-Differenzen Verfahren führt. Desweiteren identifizieren wir die Beziehungen zwischen DC PSE Operatoren und Operatoren, die in *corrected smoothed particle hydrodynamics*, *reproducing kernel particle methods*, *differential reproducing kernel* und *moving least squares* Approximationen, sowie in *vorticity redistribution schemes* benutzt werden. Wir untersuchen die vorgestellten DC PSE Operatoren hinsichtlich ihrer Genauigkeit, Konsistenzordnung, Effizienz, numerischer Dispersion, numerischer Diffusion und Stabilität und vergleichen sie sowohl mit den unkorrigierten PSE Operatoren als auch, wenn angemessen, mit herkömmlichen Differenzenquotienten. Wir besprechen die Operatoren auf Basis mehrerer Testprobleme.

Die Beurteilung von Operatoren hängt stark von der Auswahl der Testprobleme ab. Deshalb führen wir drei objektive problemunabhängige Maße zur Beurteilung der Qualität der Operatoren ein. Wir führen ihren Nutzen für die Auswahl geeigneter Operatoren vor und veranschaulichen mit ihrer Hilfe wie die Eigenschaften des Operators von seinen freien Parametern abhängen.

Schließlich formulieren und testen wir eine numerische Methode für die Lösung von Transportgleichungen, die auf DC PSE Operatoren basiert. Sie vereint Konzepte Lagrangescher Partikelmethode mit adaptiver Selbstorganisation der Partikel, die auf paarweisen Interaktionen basiert. Die Anforderungen, die durch das Vorhandensein mehrerer Skalen auftreten, werden mit Hilfe einer Überwachungsfunktion befriedigt, die dazu dient die Interaktionspotentiale zu skalieren. Eine Partikeleinführungs- und entfernungsstrategie garantiert, dass sich sowohl die lokale Partikeldichte als auch die Gesamtzahl Partikel den Anforderungen dynamisch anpasst. Alle Berechnungen sind lokaler Natur, so dass sich die Methode für die Parallelisierung auf *distributed-memory* Mehrprozessorsystemen eignet.