

de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXVI, pp.775-791 Sergio A. Elaskar, Elvio A. Pilotta, Germán A. Torres (Eds.) Córdoba, Argentina, Octubre 2007

PROPIEDADES DE UNA NUEVA ESTRATEGIA DE SUAVIZADO DE MALLAS

Ezequiel J. López, Mario A. Storti y Norberto N. Nigro

Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC), INTEC-CONICET, Universidad Nacional del Litoral, Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina, ejlopez@ceride.gov.ar, http://www.cimec.org.ar

Palabras clave: Dinámica de mallas, Generación de mallas ortogonales, *Untangling-smoothing* simultáneos de mallas.

Resumen. En este artículo se presentan varias características de una nueva estrategia de suavizado (smoothing) de mallas. La técnica fue diseñada por los autores para el cálculo de la dinámica de la malla en problemas de interacción fluido-estructura resueltos mediante una formulación tipo ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian). La citada estrategia, se basa en la minimización global de un funcional no lineal que mide la distorsión de la grilla empleando un indicador geométrico de calidad elemental. Este indicador se define para elementos símplices, teniendo como referencia el elemento equilátero correspondiente (triángulo o tetraedro). La calidad para elementos no-símplices se define en función de su descomposición en símplices. Con el objetivo de mejorar la aproximación inicial para el problema de minimización en cada paso de tiempo, se propone un predictor basado en la variación temporal del gradiente del funcional. La estrategia propuesta puede aplicarse para mejorar la calidad de una malla, produciendo una "relajación" inicial de la misma. Cuando esta relajación inicial no es deseada, puede modificarse el funcional a fin de que el elemento óptimo sea uno de referencia definido por el usuario, en lugar del elemento equilátero correspondiente. Además, se muestra mediante experimentos numéricos que la técnica propuesta permite la generación de mallas ortogonales en geometrías arbitrarias cuando se emplean cuadrángulos y hexaedros en 2D y 3D, respectivamente. La regularización del funcional propuesto permite obtener una técnica de untangling-smoothing simultáneos de mallas. Se presentan varios ejemplos numéricos que muestran el potencial referido de la técnica propuesta.

1. INTRODUCCIÓN

Los métodos de suavizado de mallas (mesh smoothing) son diseñados con el objetivo de mejorar la calidad de las mismas. Estos métodos reposicionan los nodos de la grilla manteniendo constante la topología (conectividad), pudiéndose clasificar en locales y globales. Los métodos locales reubican los nodos de a uno por vez considerando sólo la submalla que lo contiene. Por otro lado, los métodos globales actualizan simultáneamente la totalidad de las coordenadas nodales. Al poseer la propiedad de mover nodos, un método de suavizado puede ser aplicado para resolver la dinámica de la malla en problemas con dominios cuyas fronteras son móviles. Este tipo de problemas suele presentarse en diversas aplicaciones científicas y de ingeniería, como por ejemplo en problemas de interacción fluido-estructura resueltos con técnicas tipo ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian), problemas de sólidos con grandes deformaciones, etc. La estrategia CMD (Computational Mesh Dynamics) aplicada para resolver la dinámica de una malla resulta de gran importancia, dado que elementos de baja calidad influencian la estabilidad, convergencia y precisión de los métodos numéricos de resolución (Koobus y Farhat, 1999; Farhat et al., 2001; Farhat y Geuzaine, 2004; Farhat et al., 1998; C.O.E., 2004; Stein et al., 2004; Bar-Yoseph et al., 2001; Blom, 2000; Chiandussi et al., 2000; Kjellgren y Hyvärinen, 1998; Löhner y Yang, 1996).

Existe una gran variedad de métodos de suavizado basados en optimización, los cuales poseen el objetivo de mejorar la calidad de la malla medida con una métrica de calidad particular (Amenta et al., 1999; Amezua et al., 1995; Cannan et al., 1998; Parthasarathy y Kodiyalam, 1991; Zavattieri et al., 1998; Freitag y Knupp, 1999). Este trabajo trata acerca de una técnica de suavizado de mallas basada en la optimización de la calidad de la grilla, y desarrollada para resolver la dinámica de la malla en problemas de interacción fluido-estructura (López et al., 2007b). El funcional que se propone minimizar se vuelve singular cuando alguno de los elementos de la malla se invierte, restringiendo el uso del método de suavizado a mallas válidas. La regularización de este funcional permite obtener una estrategia de untangling y smoothing simultáneos de mallas (López et al., 2006, 2007a). Se tiene así una técnica CMD capaz de tratar con mallas inválidas que, a diferencia de otros métodos (Freitag y Plassmann, 2000; Kovalev et al., 2003; Escobar et al., 2003; Montenegro et al., 2003), se resuelve en forma global.

En algunas aplicaciones, la calidad de una malla suele evaluarse a través de su ortogonalidad (Haussling y Coleman, 1981; Eça, 1996; Jeng y Chen, 1999; Akcelik et al., 2001). Un enfoque clásico para la generación de mallas ortogonales es el uso de *mapeos conformes* (véase Moretti (1992)). Bajo ciertas condiciones, la técnica de untangling-smoothing que se propone en este trabajo permite la obtención de mallas aproximadamente ortogonales. Se presentan varios ejemplos que muestran esta característica de la técnica expuesta.

2. ESTRATEGIA DE SUAVIZADO

La técnica de suavizado propuesta se basa en un problema de optimización resuelto en forma global, donde el funcional representa la distorsión de la malla. Tal funcional fue definido del siguiente modo (López et al., 2007b):

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{e} F_e(\mathbf{x}) = \sum_{e} q_e(\mathbf{x})^m \tag{1}$$

siendo q_e un indicador de calidad del elemento y m un entero no negativo.

Así planteado el funcional, la estrategia es aplicable a mallas de cualquier tipo de elementos adoptando un indicador de calidad adecuado. En el presente trabajo se propone utilizar el índice

de calidad geométrico

$$q = C \sum_{i=1}^{N} q_{S,i} \tag{2}$$

donde C es una constante de normalización tal que $0 < q \leq 1$, N es el número total de las posibles subdivisiones del elemento en símplices, $q_{S,i}$ se calcula para el *i*-ésimo símplice de la subdivisión y está dado por

$$q_S = \frac{V}{\sum_j l_j^{nd}} \tag{3}$$

 l_j representa la longitud del *j*-ésimo lado del símplice, V su volumen y nd es el número de dimensiones espaciales del problema.

Esta técnica de suavizado es aplicable a la resolución de la dinámica de la malla en problemas con dominios deformables. En este caso se actualizan las coordenadas nodales a medida que transcurre el tiempo, manteniendo la topología de la malla constante. El problema a resolver para el paso de tiempo n se escribe

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}^n} F(\mathbf{x}^n) \\ & \mathbf{s} \, \mathbf{a} \, (\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^0)|_{\Gamma(t^n)} \cdot \mathbf{n}(t^n) = 0 \end{aligned} \tag{4}$$

donde \mathbf{x}^0 son las coordenadas iniciales de los nodos de la malla, $\Gamma(t)$ es la frontera del dominio y $\mathbf{n}(t)$ su normal. Como se observa, se permite a los nodos ubicados sobre la frontera del dominio deslizar en la dirección tangencial a la misma. Otra opción en cuanto a las condiciones de contorno consiste en fijar los nodos de frontera en posiciones predeterminadas, lo cual resulta más limitado pero simplifica el problema de minimización dado que se eliminan las restricciones.

3. PREDICTOR DIFERENCIAL

El problema de optimización planteado en la sección anterior consiste en hallar la posición de los nodos en cada paso de tiempo resolviendo el problema de minimización 4, lo cual se realiza aplicando la técnica iterativa de Newton-Raphson. El vector de coordenadas x se compone de nodos sobre la frontera del dominio x_b y nodos en su interior x_{int} .

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_b \\ \mathbf{x}_{\text{int}} \end{bmatrix}$$
(5)

Si las componentes x_b de x se fijan, en cada paso de tiempo el problema de minimización consiste en hallar

$$\mathbf{x}_{\text{int}}^{n} = \operatorname*{argmin}_{\tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}}} F\left(\begin{bmatrix} \mathbf{x}_{b}^{n} \\ \tilde{\mathbf{x}}_{\text{int}} \end{bmatrix} \right)$$
(6)

La fórmula de recurrencia del método de Newton-Raphson está dada por

$$\mathbf{x}_{\text{int}}^{n,k+1} = \mathbf{x}_{\text{int}}^{n,k} - (\mathbf{K}^k)^{-1} \mathbf{R}^k$$
(7)

donde

$$\mathbf{R} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}_{\text{int}}}$$

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{x}_{\text{int}}}$$
(8)

Esto genera una sucesión $\mathbf{x}_{int}^{n,k}$ que, si converge, da la solución del problema de optimización

$$\lim_{k \to \infty} \mathbf{x}_{\text{int}}^{n,k} = \mathbf{x}_{\text{int}}^n \tag{9}$$

La elección más simple para el valor inicial $\mathbf{x}_{int}^{n,0}$ consiste en tomar la solución del paso de tiempo anterior

$$\mathbf{x}_{\rm int}^{n,0} = \mathbf{x}_{\rm int}^{n-1,\infty} \tag{10}$$

Si los elementos próximos a la frontera móvil son relativamente pequeños, la combinación "artificial" $[\mathbf{x}_{int}^{n-1,\infty}, \mathbf{x}_b^n]$ puede producir elementos inválidos (invertidos), aún para pasos de tiempo pequeños. De hecho, el paso de tiempo se encuentra limitado por el tamaño de los elementos en proximidad a la frontera. Así, el paso de tiempo límite del problema de la dinámica de la malla disminuye con el refinamiento de la grilla.

Con el objetivo de evitar este problema se propone un predictor lineal para la malla inicial. Si se considera la solución $\mathbf{x}_{int}(t)$ para cada t en el intervalo $t^{n-1} \leq t \leq t^n$, entonces

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}_{\text{int}}(t), \mathbf{x}_b(t)) = 0 \tag{11}$$

Derivando con respecto al tiempo y evaluando para $t = t^{n-1}$ se tiene

$$\left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{x}_{\text{int}}}\right)_{t^{n-1}} \dot{\mathbf{x}}_{\text{int}}(t^{n-1}) + \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{x}_b}\right)_{t^{n-1}} \dot{\mathbf{x}}_b(t^{n-1}) = 0$$
(12)

Con esto, la sucesión generada por el método de Newton-Raphson puede ser inicializada con la extrapolación

$$\mathbf{x}_{\text{int}}^{n,0} = \mathbf{x}_{\text{int}}^{n-1,\infty} + \Delta t \, \dot{\mathbf{x}}_{\text{int}}(t^{n-1}) \tag{13}$$

Considérese, por ejemplo, un problema 1D con una malla homogénea de N elementos lineales en el intervalo [0, 1]. Se fija la frontera derecha y la frontera izquierda se mueve hacia la derecha con velocidad 1. Con la estrategia "standard" de inicialización, el paso de tiempo límite es inicialmente $\Delta t_{\rm CMD} = h = 1/N$, dado que un paso de tiempo mayor causaría que la frontera izquierda pase por encima de la posición del primer nodo interno (inicialmente en x = h). Por otro lado, con el predictor diferencial propuesto, el paso de tiempo límite es $\Delta t_{\rm CMD} = 1$, obteniéndose en este caso la solución óptima sin necesidad de aplicar la estregia de Newton-Raphson. Además ha sido verificado mediante experimentos numéricos que con este predictor diferencial el paso de tiempo límite $\Delta t_{\rm CMD}$ es independiente del refinamiento de la malla.

4. RELAJACIÓN DE LA MALLA INICIAL

La malla inicial del problema puede no ser óptima con respecto al funcional planteado. Considérese por ejemplo la malla estructurada M1 que se muestra en la figura 1, la cual se compone de 200 elementos triangulares. La estrategia de optimización tiende a convertir cada elemento al triángulo equilátero, de forma tal que, luego de la relajación, se obtiene la malla M3 mostrada en la misma figura. En este caso, durante el proceso de relajación los nodos sobre los lados AB, CD fueron fijados, mientras que a los nodos sobre los lados BC, AD se les permite deslizar en la dirección horizontal. Se observa que los elementos cerca de los vértices A y C tienden a achicarse, mientras que aquellos elementos cercanos a los vértices B y D tienden a aumentar su tamaño. Este efecto es causado por la forma particular en que los cuadrados fueron divididos en triángulos.

La etapa de "*relajación*" inicial puede ser deseable o no. Si la malla inicial posee una calidad baja, entonces la etapa de relajación tiende a mejorar la calidad de la misma. Sin embargo, si la malla inicial posee un refinamiento *ad-hoc*, es posible que la relajación tienda a eliminar tal refinamiento. Por ejemplo, la malla M2 en la figura 1 posee un refinamiento hacia el lado AB, con un espaciamiento horizontal 3.5 veces mayor hacia el lado CD relativo al AB. Como resultado de la etapa de relajación se obtiene la malla M3. Esta malla depende sólo de la topología de la malla inicial y de las restricciones impuestas a los nodos de frontera, pero no de la posición inicial de los nodos interiores.



Figura 1: Relajación de mallas.

El funcional puede modificarse a fin de mantener el refinamiento inicial de la malla. Obsérvese que para elementos símplices existe una única transformación lineal $(\mathbf{x}_0, \mathbf{T})$ que transforma las coordenadas $\{\mathbf{x}_{\text{reg},j}\}$ del elemento *regular* o equilátero a las coordenadas del elemento real $\{\mathbf{x}_j\}$.

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_0 + \mathbf{T} \, \mathbf{x}_{\mathrm{reg},j} \tag{14}$$

El funcional propuesto puede escribirse como una función de la matriz de transformación T

$$F_e = g(\mathbf{T}) \tag{15}$$

dado que el mismo puede calcularse, aplicando la transformación, considerando las coordenadas del elemento regular y luego calcular las longitudes de los lados, su volumen y, finalmente, el



Figura 2: Relación entre los elementos real, regular y de referencia.

funcional. Este cálculo se encuentra representado por la función $g(\cdot)$. Obviamente, el funcional no depende de una traslación \mathbf{x}_0 . Por construcción, g posee un mínimo cuando $\mathbf{T} = c \mathbf{O}$, con c un factor de escala y \mathbf{O} una matriz ortogonal, debido a que en este caso el elemento real es similar al elemento regular.

El objetivo consiste en modificar el funcional de forma tal que el elemento óptimo para F_e no sea el elemento regular, sino algún elemento de referencia con coordenadas $\{\mathbf{x}_{\text{ref},j}\}$ (véase figura 2). Para ello, se considera la transformación del elemento de referencia al elemento real

$$F_e = g(\mathbf{T} \, \mathbf{T}'^{-1}) \tag{16}$$

donde T' transforma el elemento regular al elemento de referencia.

Obsérvese que la modificación que se busca puede introducirse calculando las transformaciones \mathbf{T}, \mathbf{T}' y luego determinando el funcional con las coordenadas $\mathbf{x}'_j = \mathbf{T} \mathbf{T}'^{-1} \mathbf{x}_{\text{reg},j}$. La figura 3 presenta un ejemplo, donde la malla original posee un refinamiento hacia el lado *AB*. Este lado se deforma según una rampa de amplitud 0.2, resultando la malla que se muestra a la derecha en esa misma figura. Como se observa, la malla final posee el refinamiento hacia el lado *AB* debido a que no se produjo la relajación inicial.

Los jacobianos analíticos se calculan componiendo los calculados en la forma usual respecto a \mathbf{x}'_i con el jacobiano

$$\frac{\partial \mathbf{x}'_j}{\partial \mathbf{x}'_j} = \mathbf{T} \, \mathbf{T}'^{-1} \, \mathbf{T}^{-1} \tag{17}$$

5. ESTRATEGIA DE UNTANGLING-SMOOTHING

Como fue propuesto, el funcional es continuo siempre que $q_e \neq 0$ para todos los elementos de la malla debido a que se emplea m < 0. $q_e \rightarrow 0$ cuando para algún símplice de la subdivisión del elemento $V_i \rightarrow 0$, dado que $\sum_j l_{i,j}^{nd}$ se encuentra acotado por debajo si el símplice no tiende a colapsar en un punto. Por lo tanto, la aplicación de la técnica se restringe a mallas válidas debido a que se forman "barreras" infinitas cuando el volumen de alguno de los elementos tiende a cero, impidiendo así la obtención de una malla válida a partir de una inválida.



Figura 3: Deformación de una malla con refinamiento localizado.

Con el objetivo de evitar los problemas asociados con las singularidades referidas, el funcional puede regularizarse reemplazando V en la ecuación (3) por la función

$$h(V) = \frac{1}{2}(V + \sqrt{V^2 + 4\delta^2})$$
(18)

Esta es una función del volumen positiva y estrictamente creciente. El parámetro δ representa el valor de la función cuando el volumen es nulo.

El funcional modificado queda expresado entonces como:

$$F^*(\mathbf{x}) = \sum_e F^*_e(\mathbf{x}) = \sum_e q^*_e(\mathbf{x})^m$$
(19)

con

$$q^* = \frac{Ch(V)}{\sum_j l_j^{nd}} \tag{20}$$

Como $h(V) \neq 0 \forall V$, el funcional regularizado $F^*(\mathbf{x})$ resulta ser continuo en todo el espacio. La dependencia de h(V) con el parámetro δ es tal que

$$\lim_{\delta \to 0} h(V) = \begin{cases} V & \text{si } V \ge 0\\ 0 & \text{si } V < 0 \end{cases}$$

Entonces, a medida que δ disminuye el funcional modificado se acerca cada vez más al funcional original, al igual que sus respectivos óptimos. En el límite cuando $\delta \rightarrow 0$, $F^*(\mathbf{x}) \rightarrow F(\mathbf{x})$ punto a punto. Así, definiendo una sucesión decreciente para δ , se tiene una estrategia de untangling-smoothing simultáneos de mallas. El *k*-ésimo elemento de la sucesión adoptada, correspondiente al paso *k* en la iteración de Newton-Raphson, está dado por

$$\delta^{k} = \max(\delta^{k-1} - \alpha |\Delta\delta^{k}|, \beta\delta^{k-1})$$
(21)

 $con \alpha y \beta constantes menores que la unidad, y$

$$\Delta \delta^{k} = -\left(\frac{\partial^{2} F^{*}}{\partial \delta^{2}}\right)_{n,k-1}^{-1} \left[\left(\frac{\partial F^{*}}{\partial \delta}\right)_{n,k-1} + \left(\frac{\partial^{2} F^{*}}{\partial \delta \partial \mathbf{x}}\right)_{n,k-1} (\mathbf{x}^{n,k} - \mathbf{x}^{n,k-1}) \right]$$
(22)

Los detalles de la deducción de la ecuación (21) y la metodología de resolución pueden encontrarse en López et al. (2006, 2007a).

5.1. Flujómetro axisimétrico

Para ejemplificar el uso de la estrategia de untangling-smoothing simultáneos presentada, se resuelve la dinámica de la malla para el problema de un flujómetro axisimétrico. En la figura 4 se muestra un esquema de la geometría del dispositivo, la cual posee una frontera móvil correspondiente a la válvula del flujómetro. Inicialmente la alzada de la válvula (distancia a su asiento) es de 5 mm. La ley de movimiento es lineal, desde su posición inicial hasta una alzada mínima de 0.5 mm. Se utilizó una malla con 12133 elementos triangulares y 6394 nodos, con $h \simeq 0.2$ mm en la zona de la válvula y el asiento. En la figura 5(a) se presenta un detalle de la malla empleada. La instancia (b) de la misma figura corresponde a la malla con la cual comienza a iterar la técnica de untangling-smoothing, donde se han coloreado los elementos invertidos. La malla válida finalmente obtenida se muestra en la figura 5(c). En este caso, se aplicó toda la deformación en un solo paso con el siguiente conjunto de parámetros: m = -1, $\alpha = 1$ y $\beta = 1 \times 10^{-1}$. Respecto a las condiciones de contorno aplicadas, los nodos ubicados sobre una frontera curva fueron fijados a la misma, permitiéndose deslizar en la dirección tangencial a la frontera a aquellos que se posicionan sobre lados rectos.





Figura 5: Flujómetro axisimétrico - Detalle de la malla.

En la tabla 1 se resumen los tiempos de cómputo para obtener una malla válida para la alzada mínima de la válvula al variar la cantidad de pasos de tiempo. El problema fue resuelto aplicando y sin aplicar el predictor diferencial presentado en la sección 3. Los coeficientes empleados en la técnica de untangling-smoothing fueron elegidos en busca de minimizar la

cantidad de iteraciones necesarias (lo cual se traduce en tiempo de cálculo) cuando se utiliza un único paso de tiempo. Como se observa en la tabla, cuando se aplica el predictor diferencial el tiempo de cálculo permanece aproximadamente constante. Esto no se verifica en la columna que lista los tiempos de cálculo sin el empleo del predictor diferencial.

| Pasos de tiempo | Sin predictor | Con predictor |
|-----------------|---------------|---------------|
| 1 | 39.486 s. | 77.721 s. |
| 2 | 113.897 s. | 79.217 s. |
| 5 | 121.616 s. | 82.272 s. |
| 10 | 204.734 s. | 78.549 s. |

Tabla 1: Tiempo de cálculo total para el problema del flujómetro.

6. GENERACIÓN DE MALLAS ORTOGONALES

El ángulo interno mínimo de los elementos es generalmente usado como criterio para la calidad de las mallas. En este sentido, las mallas ortogonales son óptimas, dado que todos los ángulos internos son aproximadamente rectos. Los métodos de *mapeos conformes* generan mallas ortogonales para geometrías relativamente simples. Sin embargo, un método práctico más general para la generación de mallas ortogonales es aún un tema de investigación.

Con la técnica de movimiento de mallas propuesta es posible, bajo ciertas condiciones, obtener mallas óptimas que suelen obtenerse por métodos analíticos como por ejemplo el de mapeos conformes.

La siguiente lista resume el interés en la generación de mallas ortogonales:

- Las mallas ortogonales son óptimas de acuerdo con el criterio de ángulo interno mínimo.
- Algunos métodos numéricos se simplifican (y posiblemente se aceleran) sobre mallas ortogonales.
- Algunos métodos numéricos requieren mallas ortogonales.

6.1. Transformación para la esquina reentrante de ángulo recto

La técnica de mapeos conformes se basa en la representación del espacio en 2D como el plano complejo. Debido a que las transformaciones entre planos complejos que se derivan de funciones analíticas preservan ángulos, las mallas ortogonales pueden obtenerse mapeando el dominio real a un rectángulo, generando una malla ortogonal (Cartesiana) en ese rectángulo, y nuevamente mapeando las posiciones nodales al dominio real. La malla así otenida es aproximadamente ortogonal, es decir los ángulos en las intersecciones convergen a $\pi/2$ al refinar la malla.

Una malla de este tipo se muestra en la figura 6. La malla se obtiene mapeando el plano complejo $\zeta = \xi + i\eta$, sobre z = x + iy mediante la transformación $z = \zeta^{\frac{3}{2}}$. Esta transformación se utiliza a menudo para generar mallas ortogonales para el problema del flujo a través de la esquina reentrante de ángulo recto. La malla de la figura se obtuvo aplicando la transformación a una malla cuadrada homogénea de 30×30 elementos en el cuadrado unitario del $0 \le \xi, \eta \le 1$.

Esta malla se puede obtener con el método propuesto deformando la malla cuadrada mientras se imponen desplazamientos a los nodos ubicados sobre los lados DB y BA, y dejando libre a los nodos que se hallan sobre lados AE y ED. Sin embargo, es crucial permitir que los nodos ubicados sobre DB y BA puedan deslizarse libremente en la dirección tangencial



Figura 6: Malla ortogonal para el problema de la esquina reentrante generada con el mapeo $z = \zeta^{\frac{3}{2}}$

a la frontera, debiéndose imponer una restricción lineal sobre los desplazamientos. Si ambos desplazamientos se imponen en estos lados, entonces el espaciamiento de la malla a lo largo de ellos permanecerá constante y la malla no será ortogonal. Esto es difícil de conseguir para las fronteras curvas, donde deben dejarse los nodos deslizar libremente en la dirección tangencial, lo cual representa un restricción no lineal sobre los desplazamientos. Más aún, los nodos deberían poder deslizar a través de los vértices, como si tuvieran una curvatura grande pero finita. Esta restricción vuelve impráctico el uso de la técnica para generar mallas conformes. No obstante, se presentan algunos ejemplos con el objetivo de mostrar la potencialidad de la misma.

En este caso en particular, el problema no está bien planteado porque para un conjunto dado de posiciones nodales $\{x_j\}_{j=1}^n$, un múltiplo escalar de ellos $\{\alpha x_j\}_{j=1}^n$ posee el mismo valor del funcional. Para solucionar este problema, el funcional se regulariza agregándosele un término proporcional al volumen del elemento (López et al., 2007b).

La malla obtenida mediante el método propuesto se muestra en la figura 8. Cada elemento cuadrangular ha sido particionado en cuatro triángulos según lo explicado anteriormente, de modo que cada cuadrángulo se dibuja junto con sus diagonales. Para determinar cuantitativamente el error entre los mapeos analítico y numérico, la posición de los nodos en el eje $x = \text{Re} \{z\}$ (es decir la relación $x = x(\xi)$) se superpone en la figura 7. Como se observa, no hay error apreciable en el resultado numérico.

Para comprobar el error cuantitativo en la ortogonalidad de la malla, se determinan los ángulos en los vértices de los elementos cuadrangulares y se calcula la desviación máxima respecto



Figura 8: Malla ortogonal generada numéricamente mediante el método propuesto para la esquina reentrante. Se presentan elementos cuadrangulares con sus diagonales.

al ángulo recto para todos los elementos que convergen en un nodo. Esto se grafica para todos los nodos de la malla en la figura 9 en función de la distancia radial al origen B. Claramente, se observa un error significativo de 45° para el nodo en el origen B que está fijo y no puede mejorarse. La desviación disminuye rápidamente con la distancia al origen, y para r = 0.1 ésta

es más baja que 2.5° . Otro criterio para determinar la ortogonalidad es la desviación del ángulo entre las diagonales en el punto en el cual se intersecan con respecto a 90° . Esto se muestra en la misma figura y se observa que es significativamente más bajo que la desviación en los nodos. Esta medida de la ortogonalidad siempre es menor que 1.5° , y para r = 0.1 es menor que 0.1° .



Figura 9: Máximo ángulo de desviación en los nodos y ángulos de desviación en el centro de los elementos para la esquina reentrante.

6.2. Transformación de un cuadrado en un rombo

Otro ejemplo donde una puede obtenerse una solución es la transformación de un cuadrado en un rombo (véase la figura 10). En este caso los nodos se dejan deslizar libremente a lo largo de cada lado. Se observa que, por simetría, el número y la distribución de los nodos serán iguales en cada lado, de modo tal que los nodos no necesitan deslizar a través de los vértices desde un lado hacia otro. Cualquier otro cuadrángulo requeriría que los nodos puedan deslizar a través de los vértices, lo cual implica un tratamiento especial para este tipo de condiciones de contorno.

En la figura 10 se muestra la transformación obtenida numéricamente para una malla de elementos cuadrangulares de 30×30 , y un ángulo de inclinación de 54° . Se observa el crecimiento de los elementos cerca de las esquinas $A \ y \ C$, donde el ángulo se reduce con respecto al ángulo recto, y la contracción de los elementos en las esquinas $B \ y \ D$. Nuevamente fue calculada la desviación del ángulo entre las diagonales con respecto a 90° , presentándose en la figura 11. Los ángulos de desviación fueron ordenados y se dibujan en función del índice del elemento. Puede observarse que, con un ángulo de inclinación de 54° hay 855 elementos (el 95%) con un ángulo de desviación por debajo de 0.35° . Más aún, se calcularon los ángulos de desviación para mallas más finas de 60×60 y de 120×120 cuadrángulos para comprobar la convergencia de la malla a una malla ortogonal, es decir, conforme. En la figura 12 se muestra la distribución de la desviación de los ángulos para las tres mallas en un eje logarítmico. Se observa que mientras se reduce la desviación de los ángulos en un factor de 5 en la malla de 30×30 a la de 60×60 , la reducción en la malla de 60×60 a la de 120×120 es por un factor mayor a 100.

El mapeo conforme del cuadrado al rombo se puede hallar analíticamente mediante dos transformaciones de *Schwartz-Christoffel* (TSC). Las TSC permiten el cálculo de la transformación entre un semiplano y una región arbitraria contenida en un poliedro. Sin embargo, algunos parámetros libres de la TSC (la posición de los vértices transformados en la frontera del semiplano) se deben calcular numéricamente. Esto requiere resolver ecuaciones no lineales cuyas funciones residuales contienen integrales singulares, y por lo tanto no es una tarea simple. En este caso pueden calcularse dos TSC de modo que la primera mapea un semiplano en un cuadrado y la segunda mapea el semiplano en un rombo. Entonces, la transformación del cuadrado en el rombo se obtiene componiendo la segunda transformación con la transformación inversa de la primera.



Figura 10: Malla ortogonal generada numéricamente para la transformación de un cuadrado en un rombo. Se muestran elementos cuadrangulares junto con sus diagonales.



Figura 11: Ángulo de desviación para la intersección de las diagonales del cuadrángulo para una malla de 30×30 elementos.

6.3. Elipse

Un semiplano puede transformarse en el exterior de una elipse componiendo la transformación $v = e^w$, que mapea el semiplano $w \ge 0$ en el exterior de un círculo |v| > 1, con una



Figura 12: Ángulo de desviación de la intersección de las diagonales de los cuadrángulos para las mallas de 30×30 , $60 \times 60 \text{ y} 120 \times 120$ elementos.

transformación de Joukowski:

$$z = (1+a^2)^{-1} \left(w + \frac{a^2}{w}\right)$$
(23)

El valor de *a* se ajusta con la excentricidad de la elipse. En la figura 13 se presenta una malla de 50×50 elementos alrededor de una elipse con excentricidad $\epsilon = 0.932$ (esto corresponde a una relación entre ejes b/a = 0.361, donde la excentricidad se define como $\epsilon = \sqrt{1 - b^2/a^2}$). Los nodos sobre *BC* y *AD* se dejan deslizar libremente a lo largo de la dirección horizontal y vertical respectivamente, y los nodos sobre la frontera exterior *BD* se dejan libres. En la cáscara *AB* de la elipse se permite deslizar libremente a los nodos a lo largo de esta frontera curva. Debido a la curvatura de la frontera, se tiene una restricción no lineal sobre los desplazamientos de tales nodos. En este trabajo se imponen estas restricciones mediante penalización. La solución se obtiene mediante continuación en la excentricidad de la elipse y el parámetro de penalización.

En la figura 14 se observa la distribución del ángulo de desviación en las diagonales. La desviación máxima es de 0.002° y el 95 % de los elementos tienen desviación por debajo de 8×10^{-4} grados.

7. CONCLUSIONES

En este trabajo fue presentada una técnica de suavizado de mallas basada en un problema de optimización resuelto en forma global. El funcional a minimizar representa la distorsión de la grilla empleando índices de calidad geométricos para los elementos. Este método fue diseñado para resolver la dinámica de la malla en problemas de interacción fluido estructura. El uso de la técnica de suavizado se limita a mallas válidas, lo cual impone una restricción adicional sobre el paso de tiempo a utilizar en una simulación donde se acoplan problemas de fluidos y estructuras en dominios con fronteras móviles. Se propuso un predictor que permite aumentar el paso tiempo de máximo, el cual es independiente del refinamiento. Además, el funcional propuesto puede modificarse para que el elemento "óptimo" sea uno de referencia en lugar del



Figura 13: Malla ortogonal generada numéricamente para la región exterior de una elipse de excentricidad $\epsilon = 0.932 (b/a = 0.361)$



Figura 14: Ángulo de desviación (en la intersección de las diagonales) para la malla alrededor de la elipse.

elemento regular correspondiente. Esta modificación evita la "relajación" inicial de la malla, lo cual permite conservar, a medida que se deforma, un refinamiento ad-hoc de la grilla inicial.

Con la regularización del funcional se obtiene una técnica de untangling y smoothing simultáneos de mallas. La estrategia es muy robusta, en particular cuando se la utiliza en conjunto con el predictor diferencial propuesto. El costo computacional de esta técnica es apenas superior al costo del método original de suavizado, pero dado que no se tiene una limitación en el paso de tiempo a adoptar para la simulación, el costo total de cómputo de un problema de interacción fluido-estructura sería inferior. La técnica propuesta permite en principio la generación de mallas ortogonales en geometrías arbitrarias. Se ha demostrado experimentalmente que la desviación de la ortogonalidad tiende a cero con el refinamiento. Sin embargo, debido al hecho de que los nodos necesitan deslizar libremente en las fronteras, deben imponerse restricciones no lineales sobre las mismas. Más aún, los nodos se deben dejar deslizar a través de las esquinas. Esto plantea un problema no lineal difícil de resolver y resulta impráctico para generar mallas ortogonales en geometrías complejas. Sin embargo, esta característica se presenta aquí como una demostración de la potencialidad del método para generar mallas de buena calidad.

REFERENCIAS

- V. Akcelik, B. Jaramaz, y O. Ghattas. Nearly orthogonal two-dimensional grid generation with aspect ratio control. *Journal of Computational Physics*, 171:805–821, 2001.
- A.B Amenta, M.W. Bern, y D. Eppstein. Optimal point placement for mesh smoothing. *Journal* of Algorithms, 30:302–322, 1999.
- E. Amezua, M. Hormaza, A. Hernandez, y M. Ajuria. A method for the improvement of 3D solid finite-element meshes. *Advances in Engineering Software*, 22:45–53, 1995.
- P.Z. Bar-Yoseph, S. Mereu, S. Chippada, y V.J. Kalro. Automatic monitoring of element shape quality in 2-D and 3-D computational mesh dynamics. *Computational Mechanics*, 27:378– 395, 2001.
- F.J. Blom. Considerations on the spring analogy. *Numerical Methods in Fluids*, 32:647–668, 2000.
- S. Cannan, J. Tristano, y M. Staten. An approach to combined laplacian and optimizationbased smoothing for triangular, quadrilateral and quad-dominant meshes. *Proceedings of the Seventh International Meshing Roundtable, Dearborn, MI*, pages 479–494, 1998.
- G. Chiandussi, G. Bugeda, y E. Oñate. A simple method for automatic update of finite element meshes. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 16:1–19, 2000.
- Burg C.O.E. A robust unstructured grid movement strategy using three-dimensional torsional springs. 34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, 2004.
- L. Eça. 2D orthogonal grid generation with boundary point distribution control. *Journal of Computational Physics*, 125:440–453, 1996.
- J.M. Escobar, E. Rodríguez, R. Montenegro, G. Montero, y J.M. González-Yuste. Simultaneous untangling and smoothing of tetrahedral meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:2775–2787, 2003.
- C. Farhat, C. Degand, B. Koobus, y M. Lesoinne. Torsional springs for two-dimensional dynamic unstructured fluid meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 169:231–245, 1998.
- C. Farhat y P. Geuzaine. Design and analysis of robust ALE time-integrators for the solution of unsteady flow problems on moving grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193:4073–4095, 2004.
- C. Farhat, P. Geuzaine, y C. Grandmont. The discrete geometric conservation law and the nonlinear stability of ALE schemes for the solution of flow problems on moving grids. *Journal of Computational Physics*, 174:669–694, 2001.
- L.A. Freitag y P.M. Knupp. Tetrahedral element shape optimization via the jacobian determinant and condition number. *Proceedings of the 8th International Meshing Roundtable. Sandia National Laboratories*, pages 247–258, 1999.
- L.A. Freitag y P. Plassmann. Local optimization-based simplicial mesh untangling and improvement. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49:109–125, 2000.

- H.J. Haussling y R.M. Coleman. A method for generation of orthogonal and nearly orthogonal boundary-fitted coordinate systems. *Journal of Computational Physics*, 43:373–381, 1981.
- Y.N. Jeng y Ch. Chen. Two-dimensional orthogonal grid generation with floating boundary points. *Numerical Heat Transfer*, 36:207–232, 1999.
- P. Kjellgren y J. Hyvärinen. An arbitrary lagrangian-eulerian finite element method. *Computational Mechanics*, 21:81–90, 1998.
- B. Koobus y C. Farhat. Second order time-accurate and geometrically conservative implicit schemes for flow computations on unstructured dynamic meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 170:103–129, 1999.
- K. Kovalev, M. Delanaye, y Ch. Hirsch. Untangling and optimization of unstructured hexahedral meshes. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 43:807–814, 2003.
- R Löhner y C. Yang. Improved ALE mesh velocities for moving bodies. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 12:599–608, 1996.
- E.J. López, N.M. Nigro, y M.A. Storti. Untangling y smoothing simultáneos de mallas. *Mecánica Computacional, Volumen XXV*, 2006.
- E.J. López, N.M. Nigro, y M.A. Storti. Simultaneous untangling and smoothing of moving grids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, submitted, 2007a.
- E.J. López, N.M. Nigro, M.A. Storti, y J.A. Toth. A minimal element distortion strategy for computational mesh dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69:1898–1929, 2007b.
- R. Montenegro, J.M. Escobar, E. Rodríguez, G. Montero, y J.M. González-Yuste. Improved objective functions for tetrahedral mesh optimisation. *Lecture Notes in Computer Science*, 2657:568–578, 2003.
- G. Moretti. Orthogonal grids around difficult bodies. AIAA Journal, 30:933-938, 1992.
- V.N Parthasarathy y S. Kodiyalam. A constrained optimization approach to finite element mesh smoothing. *Finite Elements in Analysis and Design*, 9:309–320, 1991.
- K. Stein, T.E. Tezduyar, y R. Benney. Automatic mesh update with the solid-extension mesh moving technique. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193:2019–2032, 2004.
- P.D. Zavattieri, E.A. Dari, y G.C. Buscaglia. Optimizaton strategies in unstructured mesh generation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39:2055–2071, 1998.