



GENERADOR AUTOMÁTICO DE MALLAS DE HEXAEDROS **Presentación del método y avances en la implementación**

Nestor Calvo y Sergio Idelsohn

Grupo de Tecnología Mecánica de INTEC
Universidad Nacional del Litoral - Conicet
Güemes 3450 - 3000 Santa Fe

Resumen

Se presenta un generador de mallas con el cual, dada una malla exterior de cuadriláteros, se obtiene automáticamente una malla interior de hexaedros.

El método se basa en el cumplimiento de las condiciones topológicas impuestas por la malla exterior y de algunas condiciones que hacen posible la automatización del proceso.

Se presentan algunos aspectos originales de la topología de mallas de cuadriláteros y de hexaedros, que sirven de base al método de generación.

Abstract

A mesh generator is presented in which, given an exterior all quadrilateral mesh, an interior hexahedral mesh is automatically obtained.

The method is based upon the satisfaction of topological constraints from exterior mesh plus certain imposed conditions in order to realise the process automation.

Some original aspects from the quadrilateral / hexahedral mesh topology, that serve as a basis for the generation process, are also presented.

Introducción

El cuello de botella actual del Método de Elementos Finitos es el proceso interactivo de definición de la geometría y la generación de las mallas.

Si bien hay buenos sistemas de diseño asistido (CAD), aún no dejan de requerir un usuario experto para poder representar una geometría compleja. Mientras que los tiempos de procesos de cálculo se miden en horas, el diseño interactivo insume días o aún semanas.

Respecto a las mallas, existen diversos tipos de generadores que varían en el tipo de elementos que producen, la información geométrica requerida como dato entrada o los algoritmos empleados para la generación.

Los sistemas generadores de símplexes (triángulos / tetraedros) están trabajando desde hace algunos años. Con bastante éxito los basados en los métodos de Delaunay, quadrees / octrees y avance frontal o modificaciones mejoradas de los mismos.

Hay algunos generadores de cuadriláteros que dan resultados satisfactorios, mencionaremos el que se basa en el método de "paving"¹, con su reciente generalización a superficies tridimensionales².

Para el caso de mallas de hexaedros, el problema no está suficientemente investigado ni adecuadamente resuelto.

El método de mapeo y transporte³, se basa en "mover" y deformar mallas de cuadriláteros generando una malla de hexaedros no estructurada en dos dimensiones y estructurada en una tercera.

En el método de multibloques³, se divide el dominio en bloques de topología hexaédrica que se rellenan con mallas estructuradas.

El de subdivisión por superficies medias⁴, malla el interior de superficies topológicamente equivalentes a poliedros simples, con vértices trivalentes y caras de 3, 4 o 5 lados.

En este trabajo, presentamos los primeros avances en la implementación de un método enteramente nuevo. Se basa en la generación de la malla dual⁵ a la deseada y no requiere de ningún tipo de subdivisión del dominio.

Si bien este método es adecuado, tanto para superficies como para cuerpos, la implementación es distinta. Hemos encarado directamente el problema del mallado con hexaedros, por lo cual la implementación presente requiere la provisión de la malla exterior de cuadriláteros. Dado que ya existen generadores para superficies, podemos decir que el método es general y totalmente automático.

La esencia del método es la misma que la del problema de mallar con hexaedros. Es muy difícil "ver" y analizar lo que sucede en el interior de una malla no estructurada. Si en lugar de analizar la malla, analizamos el dual, los procesos de generación y el análisis de los condicionantes son mucho más fáciles de ver y resolver.

Indicaciones para la construcción de una malla de cuadriláteros

Presentaremos el método a través de un ejemplo en el plano.

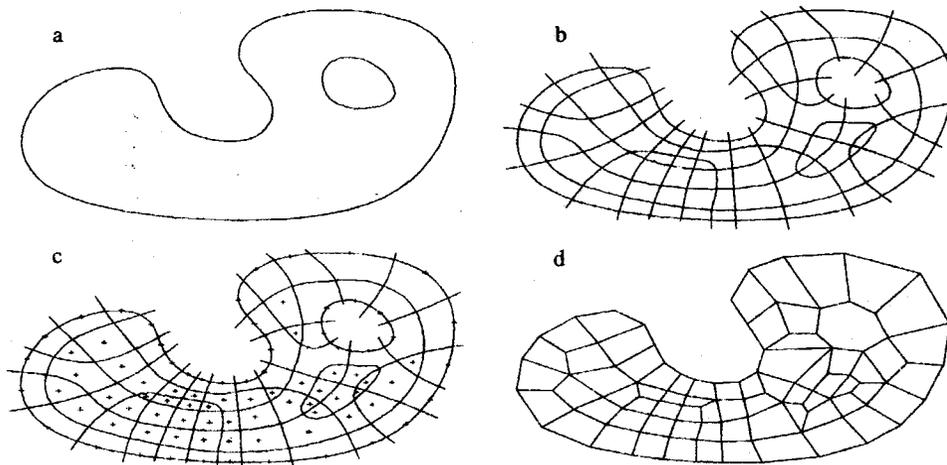


Figura 1. Mallado del interior de una región plana.

Para mallar el interior del dominio indicado en la figura 1a, trazamos un conjunto de líneas (1b). A cada región definida le asignamos un punto (1c). En las regiones externas, el punto se coloca sobre la frontera. Finalmente, unimos los puntos de regiones adyacentes y obtenemos la malla (1d).

Hemos construido una malla partiendo del trazado de su dual. Observamos que, así como a cada región del dual le hicimos corresponder un nodo de la malla, a cada elemento de la malla le corresponde un vértice del dual, y a cada arista de la malla una del dual.

Para evitar excesivas explicaciones, convengamos en llamar vértices, segmentos y polígonos a los componentes del dual ortogonales a los elementos, aristas y nodos de la malla.

Obtuvimos una malla conforme de cuadriláteros por el hecho de que no cortamos ni bifurcamos ninguna línea en el interior del dominio. En cada vértice del dual convergen cuatro segmentos (dos líneas) ortogonales a las cuatro aristas del elemento cuadrilátero.

También se puede apreciar que a una línea del dual corresponde una "hilera" o corte unidimensional de elementos. Los cuadriláteros del corte son adyacentes por aristas siempre opuestas. Esto lleva a que las líneas sean (deban ser) cerradas o comenzar y terminar en la frontera, sin bifurcaciones.

El proceso demuestra que la frontera de una malla de cuadriláteros está compuesta por un número par de aristas. Se puede ver la correspondencia entre las aristas de la frontera y los segmentos extremos de las líneas del dual.

Si bien las líneas pueden ser abiertas o cerradas o aún autointerceptarse, conocemos algunas limitaciones al trazado libre:

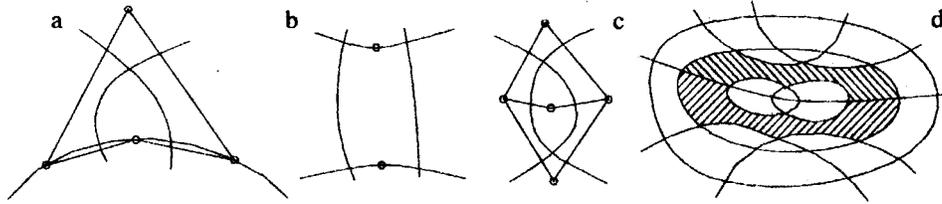


Figura 2. Limitaciones al libre trazado de las líneas del dual.

1. En un vértice no pueden cruzarse más de dos líneas. En caso contrario quedaría un polígono indefinido y reducido a un punto.
2. La transformación del elemento al cuadrado unitario o maestro debe ser con Jacobiano positivo en todos los puntos. Esto elimina la posibilidad de elementos con ángulos internos mayores o iguales a 180° . Cuando esto sucede en el interior del dominio, se puede evitar con técnicas de suavizado de la malla. Pero en la frontera, una situación como la de la figura 2a, no debe admitirse.
3. Toda línea debe tener al menos un vértice. Equivale a decir que toda línea atraviesa al menos un elemento, lo cual parece obvio, pero existen formas de violar esta condición: generando una línea cerrada que no encierre ningún vértice, trazando dos líneas paralelas entre dos porciones de la frontera sin que haya ninguna línea que las cruce (2b), o en forma equivalente, trazando una línea de un elemento de frontera a uno de los adyacentes.
4. Dos elementos pueden compartir una arista, un nodo o nada. Para las regiones poligonales vale la misma condición. No se admite que dos vértices del dual estén unidos por dos segmentos, como en la figura 2c (en lugar de uno único) pues generan dos regiones unidas por dos vértices. Tampoco pueden unirse dos polígonos por dos segmentos, como se muestra en la figura 2d.
5. Si en lugar de una frontera suave como la de la figura 1, se parte de una con vértices preestablecidos, deberá haber una región externa por cada vértice fijo.

Cuadro 1. Condiciones topológicas.

Si todos los vértices de la frontera (malla 1-D) viniesen preestablecidos (y en necesario número par), la única posibilidad de control de densidad es agregar líneas cerradas, pero el método no cambia. Podemos ver que la única condición necesaria para que sea mallable es que la frontera tenga "longitud" par. Si la frontera es disconexa (figura 1), las piezas individuales pueden tener longitud impar pero el total no.

No podemos demostrar que la lista sea exhaustiva, pero las únicas restricciones que hemos encontrado experimentalmente (en 3-D) son las indicadas en el punto 4 de la tabla 1, o se reducen a ellas.

Además de las limitaciones requeridas para producir una malla válida existen otras condiciones que garantizan la calidad de la malla. Nos referimos aquí a la ortogonalidad geométrica o perpendicularidad de caras y aristas y a la necesidad de cumplir con una función de densidad y tamaño de los elementos.

1. Elementos con ángulos cercanos a los 90° se corresponden con líneas lo más ortogonales posibles. (Nos referimos a la sucesión de segmentos rectilíneos del dual y no a la versión suavizada de las figuras 1 y 2 donde, de hecho, pueden hacerse siempre ortogonales). Por la misma razón, los polígonos cuadriláteros son preferibles a los triangulares o pentagonales, éstos a los hexágonos y así sucesivamente.
2. La densidad de líneas se corresponde con el tamaño de los polígonos y con el de los elementos, debe estar en concordancia con el grado de refinamiento deseado para la malla.

Cuadro 2. Condiciones Geométricas.

Si bien hemos descripto la situación en el plano, no es difícil imaginar que nada se altera si hablamos de cualquier superficie tridimensional, convexa o cóncava, abierta o cerrada. En el caso de una superficie cerrada, la única particularidad es que las líneas del dual son siempre cerradas.

Extensión del método a mallas de hexaedros

Tampoco es difícil imaginar la extensión a 3-D. La frontera exterior será una superficie cerrada que luego del mallado en el interior, se transformará en una malla cerrada de cuadriláteros.

El mismo papel que jugaban las líneas en 2-D ahora lo tendrá un conjunto de superficies. Las superficies pueden ser abiertas y atravesar el dominio o cerradas e interiores. Deben cumplir exactamente las mismas restricciones y criterios mencionados en las tablas 1 y 2 para el caso bidimensional.

Las superficies al interceptarse mutuamente generan los poliedros, las líneas y los vértices del dual. La mutua ortogonalidad es ahora (y en general) entre "complementos dimensionales": vértices / elementos, segmentos / caras, polígonos / aristas y poliedros / nodos.

Los poliedros son siempre de vértices triédricos o trivalentes dado que las superficies se cortan de a tres.

Las superficies cortan a la malla en un conjunto bidimensional de elementos. Cada uno está rodeado por otros cuatro adyacentes por dos pares de caras mutuamente opuestas, o bien es un elemento de la frontera.

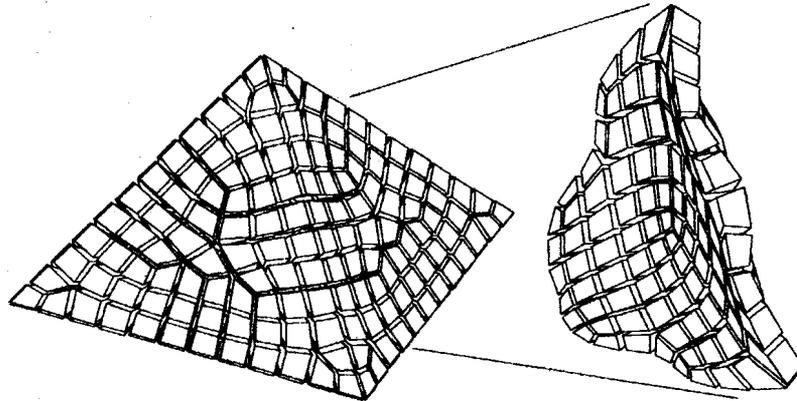


Figura 3. Malla en un hexaedro triangular. Se muestran los elementos de una superficie.

En la figura 3, se observa el conjunto de elementos correspondiente a una superficie. A la malla bidimensional formada por la intersección de una superficie con la malla de hexaedros la llamaremos corte.

Un corte es cerrado e interno o abierto y limitado por la frontera. En el último caso, define con la frontera una línea cerrada conexas o disconexas (ej.: un corte cilíndrico) que es, a su vez, frontera (1-D) del corte.

La intersección de una superficie con la frontera es una línea del dual de la frontera.

La intersección de dos superficies genera una o más líneas, cerradas e interiores y/o abiertas. Estas últimas acompañan a ambas superficies hasta interceptarse con la frontera en dos vértices, que corresponderán a dos caras de la frontera. Esto da un necesario y automático número par de caras en la frontera.

Metodología utilizada para la implementación

El método es sospechosamente simple, obviamente la implementación automática no lo es.

En 2-D, no es sencillo cumplir a la vez con las prescripciones referidas a ortogonalidad geométrica y densidad de líneas. En 3-D la situación es peor.

Además de la función, que prescribe el tamaño de los elementos en cada punto, debe proveerse al programa de la información geométrica que describa la frontera.

Se puede intentar una infinidad de mecanismos para construir el dual de la malla de hexaedros:

Podría pensarse en generar tres series de planos paralelos a los coordenados y deformarlos luego para mejorar la ortogonalidad a frontera. Luego puede refinarse la malla con el agregado de superficies cerradas interiores para satisfacer la densidad requerida.

Otra posibilidad sería generar sucesivas subdivisiones de la frontera con tres superficies ortogonales entre sí y con la frontera, pasando por puntos previamente incorporados al dominio.

También puede intentarse llenar el dominio con poliedros de vértices triédricos, un generador de elementos menos restrictivo que sólo tetraedros o hexaedros.

Aprovechando la existencia de generadores de mallas de cuadriláteros, decidimos implementar otra posibilidad: partir de una malla exterior predefinida. Es la opción más condicionante y por lo tanto requiere tomar menor cantidad de decisiones.

En tal caso, las líneas del dual exterior ya están definidas y sólo falta resolver el juego interior de intersecciones de las superficies abarcadas por esas líneas.

Vimos que a cada superficie abierta la rodea una línea de la frontera. Los vértices de intersección de dichas líneas son extremos de la línea de intersección de las superficies.

El problema principal de partir de una malla exterior es que las líneas del dual de la frontera pueden ser extremadamente caprichosas en su recorrido. Los autocruces y las múltiples intersecciones no son raras.

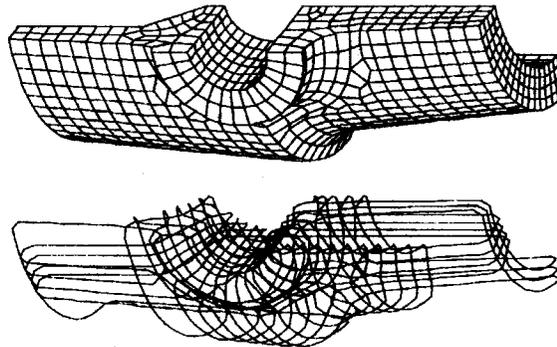


Figura 4. Malla exterior con una línea extremadamente compleja.

Los autocruces de líneas en el exterior responden a autocruces en las superficies, y tienen un tratamiento muy complicado que preferimos evitar por ahora. De la misma forma cuando dos líneas se interceptan en más de dos vértices, hay que elegir la correspondencia entre líneas interiores y pares de puntos.

Existen dos juegos de transformaciones que pueden realizarse para hacer desaparecer autointersecciones e intersecciones múltiples. Uno implica la eliminación de elementos o aristas originales, con el excesivo requerimiento de información asociado y la posibilidad de reducir peligrosamente la curvatura y densidad de la malla. El otro, que es el que implementamos, realiza transformaciones en el interior del elemento que contiene al vértice de cruce, aquí el problema es la generación de elementos muy deformes (figura 5) que no pueden ser mejorados por el simple reposicionamiento de nodos.

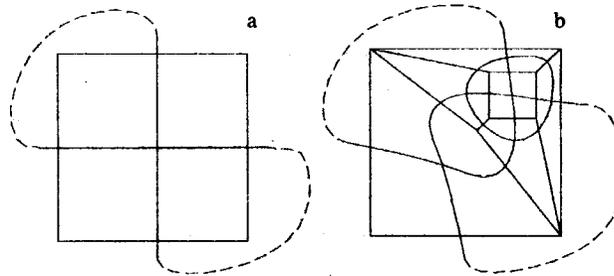


Figura 5. Eliminación automática de autocruces y cruces múltiples dentro de un elemento.

Actualmente tenemos dos variantes en funcionamiento. Una la que corrige automáticamente las líneas dentro de cada elemento de cruce. La otra genera un archivo de CAD con las líneas a ser corregidas. Es esta última la que da mejores resultados y no es difícil hacer esas correcciones pues en CAD se puede ver la forma de alterar la malla sin mayores riesgos, automáticamente sería muy costoso.

Resta analizar si “toda malla cerrada de cuadriláteros puede ser frontera de una malla de hexaedros”.

En un trabajo en preparación, estamos analizando a fondo las cuestiones topológicas, pero aquí podemos adelantar algunas conclusiones limitadas que se relacionan con la implementación actual.

Si aceptamos que el dual de la malla exterior:

1. es homeomorfo con la esfera (se puede “inflar” hasta hacerse esférico),
2. no tiene líneas que se autointercepten,
3. no tiene líneas que se crucen en más de dos vértices y
4. no tiene dos líneas que se intercepten entre sí y no sean interceptadas por una tercera, tal malla puede ser frontera de una malla de hexaedros.

Cuadro 3. Requerimientos del programa.

La última condición impide que se generen superficies que se interceptan en alguna línea sin vértices interiores. Surgió en forma experimental al evitar automáticamente autointersecciones.

En el caso de superficies sobre un toro u otra superficie orientable de género (cantidad de agujeros)⁵ mayor que 0, existe la posibilidad de que rodeando un asa o tubo haya una línea de longitud impar, dentro de la cual no puede haber una malla bidimensional y por lo tanto no puede haber un corte.

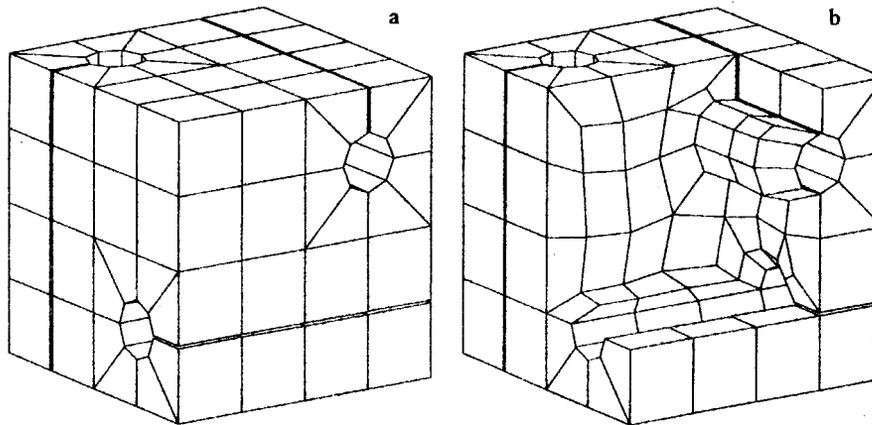


Figura 6. Malla en un cubo con tres agujeros cilíndricos.

Aún en el caso en que sea posible mallar el interior^a. Nuestro generador, en su estado actual, no es compatible con líneas que se intercepten en un número de vértices distinto de dos (extremos necesarios de una línea). Garantizar tal requisito en toros es extremadamente difícil. Resulta más fácil provocar un corte y proveer una malla duplicada tapándolo o directamente resolver la malla por partes.

En la figura 6, se muestra un ejemplo de superficie de partida de género 3 en la que debieron practicarse cortes y generar las mallas de los mismos (en este caso, manualmente en CAD). Se han removido algunos hexaedros para mostrar el mallado interior.

Toda línea cerrada del dual de una malla de cuadriláteros, que se pueda deformar continuamente, sin separarse de la superficie, hasta contraerse a un punto, tiene longitud par.

A una malla de cuadriláteros le extraemos la hilera de elementos correspondiente a una línea. Si la línea no se autointercepta ni encierra agujeros o rodea un tubo, la malla queda dividida en dos mallas abiertas. Las mallas abiertas tienen frontera de longitud par. Por lo tanto hemos extraído un número par de cuadriláteros^b. Tales líneas pueden ser malladas en su interior.

A diferencia del caso 2-D, donde los extremos de una línea eran libres, ahora estamos obligados a respetar la prescripción del principio y el final de cada línea. Aun así, la malla interior no es única. Para llegar a una solución debemos eliminar las arbitrariedades definiendo la malla mínima:

1. No tiene líneas cerradas en el interior. Tales líneas surgen de intersecciones absolutamente internas entre superficies o de superficies cerradas interiores. En la malla mínima, si dos líneas se interceptan en el exterior en $p (\geq 0)$ ^c pares de puntos, sus superficies se interceptan en p líneas. Así se evitan también los errores mostrados en la figura 2 c y d o en el punto 4 del cuadro 1.
2. A cada línea corresponde una superficie. Si admitimos que las superficies pueden ser semicerradas (cilindros), cualquier par de líneas podría ser considerado límite disconexo de una superficie, en la malla mínima no.

Cuadro 4. Malla mínima.

^a Si las líneas que no puedan "contraerse" a un punto son todas de longitud par.

^b Una línea que se autointercepta genera más de dos regiones. Si exceptuamos los cuadriláteros de los vértices de autointercepción, tenemos una suma de números pares y, entonces, un número par de elementos. En cada uno de los elementos de cruce, la dual pasa dos veces. Aún cuando no cruce un número par de elementos, la línea tiene longitud par.

^c En el estado actual del programa p es 0 o 2.

El resto de los errores mostrados en la figura 2, se evitan introduciendo una única línea (superficie) cerrada interior paralela a la frontera como una cáscara u offset interior. Esta superficie contiene los vértices mas externos del dual.

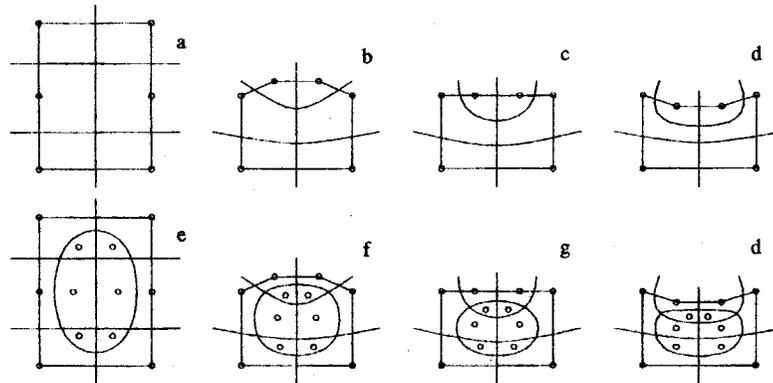


Figura 7. Eliminación de errores geométricos provocados al aplicar la misma topología.

Las mallas no están indicadas para evitar confusión, pero son fácilmente visibles. Vemos que si bien para los casos a y b, lo mejor es generar dos cuadriláteros, es imposible en c y d. La cáscara permite utilizar en cualquier caso geométrico la misma solución topológica.

Para la malla, la cáscara implica que cada cuadrilátero de la frontera pertenecerá a un hexaedro distinto. En los vértices agudos de la frontera, la agudeza se duplica (puede verse en la figura 6), pero la malla es automáticamente válida.

Existe aún una indeterminación en cuanto al orden de los vértices de cada línea (figura 8). Al interceptarse tres líneas (cuatro superficies), forman un triángulo (tetraedro), cuya orientación es indeterminada. Es posible escoger cualquier orientación, pues todas son topológicamente válidas. Si sucede lejos de la frontera no trae ningún problema, contra la frontera puede generar elementos con ángulos inválidos. Es la cáscara, otra vez, la que salva la situación de posibles errores geométricos.

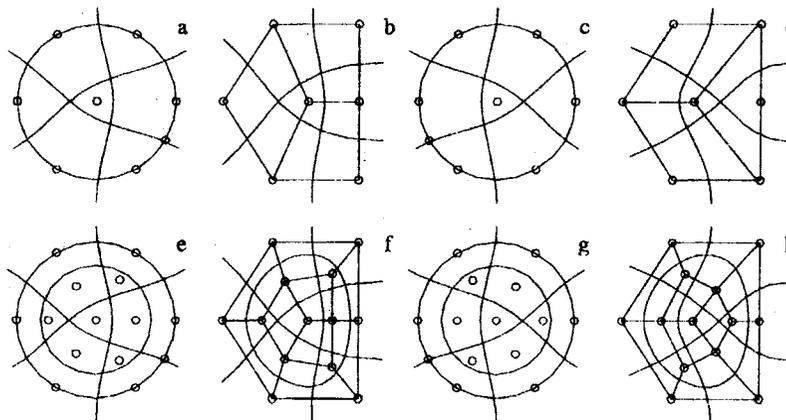


Figura 8. Eliminación de errores geométricos provocados al aplicar distinta topología.

La introducción de la cáscara interior (en 3-D la extensión es evidente) hace posible implementar el programa de modo que se consideren sólo los aspectos topológicos hasta el final del programa en donde se ubican geoméricamente los vértices del dual y luego los nodos de la malla.

En conclusión, para una malla exterior que cumple las condiciones del cuadro 3, podemos siempre generar la malla mínima ampliada con una cáscara interior, sin provocar ningún error topológico.

Al final, y aún no implementada, la rutina de refinamiento agregará superficies interiores cerradas para cumplir con los requerimientos de densidad de elementos. Hasta el momento disponemos de una malla tan densa como lo requiera la malla de frontera.

Detalles de la implementación

El programa continúa desarrollándose. Se agregan posibilidades y eliminan restricciones, en la medida en que podemos mejorar las rutinas y comprender mejor la topología de las situaciones más complejas.

Una vez leída la malla exterior, de un archivo de CAD o como la salida de un generador de cuadriláteros, se identifican y unifican las normales a cada elemento para distinguir el interior de la malla.

Para saber si hay que "soldar" nodos por errores del archivo de entrada, se utiliza la relación de Euler para los polígonos. En el caso de caras cuadriláteras, la relación se reduce a que debe haber dos nodos más que el número de caras. En caso de no cumplirse la relación, se asigna el mismo nodo a los que estén a una distancia menor que un radio predefinido.

A partir de aquí y hasta el posicionamiento de los vértices en el espacio, se trabaja con algoritmos para números enteros, acelerando en gran medida la ejecución del programa.

Se generan las líneas del dual exterior que a la vez se asignan a la cáscara (son equivalentes).

Luego se chequea el resto de las condiciones del cuadro 3: la existencia de autointersecciones, de intersecciones en número distinto de dos, y líneas que se intercepten sin una tercera, con la opción de corrección automática o de generación de un archivo para CAD con las líneas no aceptables.

Creemos que la solución definitiva es desentrañar los mecanismos necesarios para mallar aún con tales líneas. Por el momento, mientras investigamos el problema, las correcciones las hacemos, en general, manualmente en CAD y no suelen ser muy complicadas.

Para definir los vértices internos, se analizan las intersecciones de las líneas de la frontera. Una vez definidos todos los vértices, las líneas y las superficies a las que pertenecen, se deducen las regiones de cada superficie utilizando subdivisiones sucesivas con las líneas interiores.

Luego con una rutina semejante al método de avance frontal, se arman los poliedros interiores uniendo caras adyacentes hasta cerrarlos.

Reaparece la métrica para ubicar los vértices del dual en el interior del dominio.

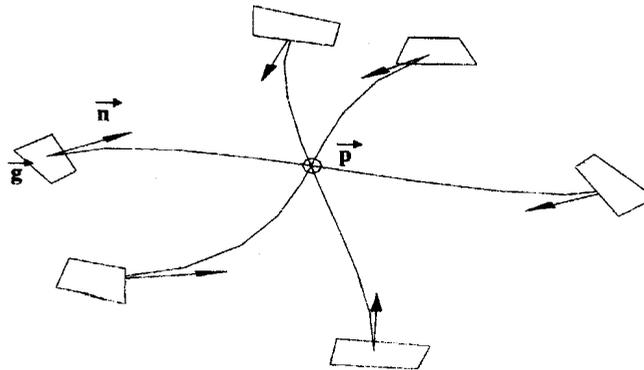


Figura 9. Ubicación de los vértices del dual.

La posición que le asignamos es un promedio de traslaciones de los puntos extremos según las normales a las caras de la frontera, ponderado con la cantidad de segmentos entre el vértice y cada extremo:

$$\bar{p} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 (\bar{g}_i + d_i \bar{n}_i), \quad (1)$$

p es el punto asignado al vértice, g el centro geométrico de las caras y n la normal hacia la malla, están indicados en la figura 9. La "distancia" d es la cantidad de segmentos que hay entre el vértice y la cáscara mas medio segmento correspondiente a la distancia de la cáscara a la frontera.

Posteriormente, al centro geométrico de cada región le asignamos un nodo de la malla y construimos los elementos hexaédricos uniendo poliedros adyacentes.

Finalmente, aplicamos técnicas de reposicionamiento de los nodos. Utilizamos un algoritmo que asigna a cada nodo la posición correspondiente al centro de gravedad de los nodos conectados a él a través de una arista, pesando cada uno con la cantidad de elementos que comparten la arista.

Si bien la rutina de posición de vértices se ejecuta en un solo paso, pues depende solo de parámetros fijos, la posición de nodos depende de los vecinos, por lo tanto relajamos los movimientos a un porcentaje (~20%) del requerido en cada paso e iteramos hasta que el movimiento sea menor que el requerido. El movimiento mínimo lo igualamos al radio utilizado para soldar nodos.

Conclusiones

El generador, en su estado actual es útil para una gran cantidad de casos, pero es evidente que hay una fuerte necesidad de continuar con el desarrollo de algunas rutinas y el mejoramiento de otras. También resta analizar mas a fondo la topología del problema general, sin condiciones.

Creemos que, aún con todo el trabajo que resta, el desarrollo del método constituye un avance importante que ayudará al mejoramiento de las técnicas en el área de generación de mallas.

Agradecimientos

Queremos agradecer la colaboración de Enzo Dari y Marcelo Venere por el fructífero intercambio de ideas durante la etapa de investigación básica del método y la de Norberto Nigro por su paciente colaboración en las aburridas etapas de implementación de las rutinas.

Referencias

- ¹ T. D. Blacker and M. B. Stephenson, "Paving: a new approach to automated quadrilateral mesh generation", *Int. J. numer. methods eng.*, **32**, 811-847 (1991).
- ² R. J. Cass, S. E. Benzley, R. J. Meyers and T. D. Blacker, "Generalized 3-D paving : an automated quadrilateral surface mesh generation algorithm", *Int. J. numer. methods eng.*, **39**, 1475-1489 (1996).
- ³ P. L. George, "Automatic mesh Generation. Application to Finite Element Methods", John Wiley - Masson, Paris 1991.
- ⁴ M. A. Price and C. G. Armstrong, "Hexahedral mesh generation by medial surface subdivision : part I. Solids with convex edges", *Int. J. numer. methods eng.*, **38**, 3335-3359 (1995).
- ⁵ T. L. Saaty and P. C. Kainen, "The four color problem. Assaults and Conquest", Mc Graw - Hill, Great Britain 1977.