

MALLAS DE POLIEDROS:

Una solución sencilla para muchos problemas actuales de la Mecánica Computacional.

Nestor A. Calvo y Sergio R. Idelsohn

CIMEC – CONICET
Güemes 3450, (3000) Santa Fe, Argentina
e-mail: ncalvo@ceride.gov.ar sergio@ceride.gov.ar

Palabras clave: Polyhedral Mesh, Extended Delaunay Tessellation, Voronoi-based Interpolation, Laplace interpolant.

Resumen. *En trabajos previos hemos presentado la Teselación Delaunay Extendida (EDT) para la generación de mallas de poliedros que tienen sus vértices aproximadamente en una misma esfera. Utilizando poliedros en distintos métodos numéricos se han encontrado grandes ventajas por sobre los tradicionales elementos tetraédricos o hexaédricos. Dichas ventajas indican la posibilidad de una generalización, relajando algunas limitaciones para incluir una gama más amplia de poliedros.*

Donde más se han evidenciado las ventajas de utilizar mallas poliédricas es en la captura precisa de superficies libres de fluidos y en aquellos casos que requieren una malla (o un control de la misma) en cada paso de tiempo. Además, los poliedros, a diferencia de los elementos clásicos, son capaces de absorber una gran deformación de la malla antes de presentar serias complicaciones numéricas.

El presente trabajo es un análisis de las ventajas y los límites de la extensión a poliedros no esféricos y un estudio de las funciones de forma que podrían utilizarse como interpolantes.

1. INTRODUCCIÓN

La triangulación Delaunay de un conjunto de puntos es la unión de todos los símlices (puntos, segmentos, triángulos, tetraedros, ...) definidos por puntos del conjunto cuya circunferencia no contiene ningún otro punto del conjunto. Es una herramienta muy poderosa para generar mallas simpliciales para el MEF, principalmente porque se han desarrollado y perfeccionado algoritmos capaces de generar muy rápidamente la triangulación de un conjunto de puntos^{1,2,3,4,5} y, al menos en dos dimensiones, los triángulos que se obtienen resultan cualitativamente adecuados para ser utilizados en el MEF. Pero adolece de dos defectos que requieren un postratamiento muy costoso. El primero es que todos los algoritmos requieren que no haya más de tres puntos en un mismo círculo ni más de cuatro en una misma esfera. En la práctica esto no se cumple casi nunca, obligando a adoptar medidas computacionalmente costosas para sobrellevarlo. El otro problema, mas grave aún, se produce en tres dimensiones por la existencia de nodos prácticamente coplanares que forman los tristemente célebres "slivers", que son tetraedros con dos aristas opuestas muy próximas⁶. Los slivers tienen volumen y Jacobiano casi nulos y correspondientemente, las derivadas de las funciones de forma tienden a infinito. Son la fuente primordial de los errores de cálculo en elementos tetraédricos y por lo tanto de dolores de cabeza para quien programa generadores de mallas y debe evitarlos.

En contraste, las mallas de cuadriláteros y hexaedros no tienen esos problemas, pero no hay ningún método para construirlas que comparta la facilidad y velocidad de los algoritmos simpliciales. La generación de cuadriláteros se puede hacer por avance frontal o por unión de triángulos⁷, ambos métodos mucho mas onerosos en términos computacionales y para los hexaedros, no hay al presente ningún método general que funcione en forma robusta⁸.

El suavizado es un postratamiento cosmético de la malla que reposiciona los nodos para evitar todos los problemas antes mencionados. Pero más allá del costo computacional, que siempre es muy alto⁹, en métodos de puntos y Lagrangianos es impracticable pues los nodos no pueden ser movidos.

En los métodos de puntos toda la información del problema se aloja en un conjunto de puntos que definen el dominio. Los puntos se mueven y sus variables asociadas cambian con el tiempo, según un proceso gobernado por ecuaciones diferenciales discretizadas o por la interacción mutua de las partículas-punto. Pero aún los métodos sin malla requieren de una malla. El análisis sobre un conjunto de puntos requiere de algunos datos geométricos que deben ser evaluados previo al cálculo físico; principalmente la frontera del dominio y el entorno de cada punto. Si bien es cierto que esa información geométrica no es exactamente la misma que la de una malla tradicional del MEF, es topológicamente asimilable y, de hecho, puede obtenerse a partir una malla construida con los puntos materiales, en la medida en que el costo de producción de dicha malla sea aceptable.

Todos los aspectos geométricos de los problemas planteados son resueltos en tiempos de orden prácticamente lineal utilizando la Teselación Extendida de Delaunay o EDT¹⁰, que consiste básicamente en una triangulación estándar y una poliedrización que une símlices vecinos formando elementos poliédricos que resultan tener muchas ventajas; tanto sobre los

tetraedros, principalmente por la ausencia de degeneraciones como sobre los hexaedros por la facilidad de construcción. Las mallas construidas por EDT no requieren de ningún postratamiento de suavizado, por lo que resultan adecuadas tanto para ser utilizadas como mallas de elementos finitos como para extraer información geométrica de una nube de puntos.

El presente artículo describe someramente el proceso de poliedrización para enfocarse luego en señalar algunas ventajas adicionales y nuevas posibilidades que se han encontrado trabajando con poliedros en el MEF y en métodos sin mallas.

2. POLIEDRIZACIÓN

En el método de elementos finitos, el dominio se particiona en elementos. En contraste, para los métodos de puntos toda la información se aloja los nodos. Pero aún en este último caso se requiere la definición del entorno de cada punto; esto es, el conjunto de puntos (ceranos) con los cuales interactúa cada punto. Para definir el entorno de un punto se pueden utilizar una malla, en la medida en que la información se pueda generar rápidamente; en tiempos de orden cercano a n , a lo más $n \log(n)$, siendo n la cantidad de nodos. Con la EDT, la malla se genera precisamente con ese costo computacional, por lo que resulta adecuada tanto para generar una malla partiendo de la frontera definida desde CAD, como para poliedrizar una nube de puntos móviles.

La poliedrización se obtiene, tal cual se explica en publicaciones previas¹⁰, por unión de símplexes vecinos con circunsferas “próximas” y en 3D se agrega la posterior captura de poliedros vecinos cuyos nodos pertenezcan todos al poliedro “mayor” (típicamente slivers).

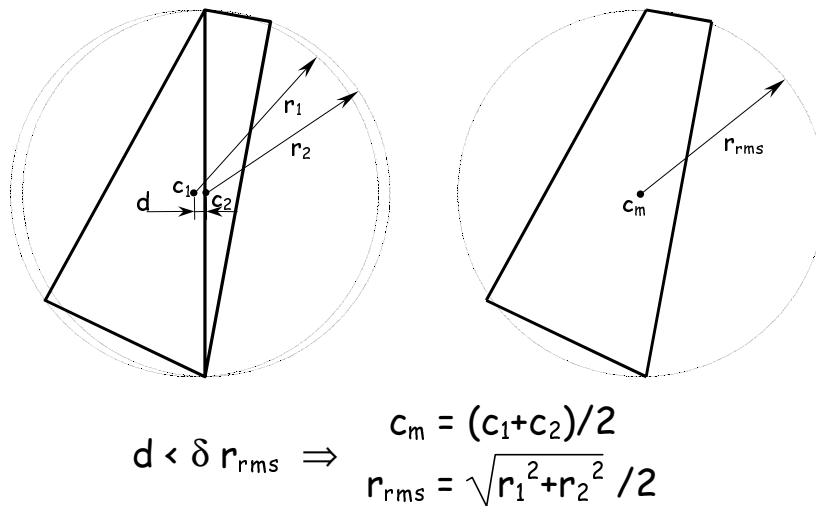


Figura 1: Proximidad de esferas en la poliedrización.

Dos circunsferas de elementos vecinos se consideran suficientemente próximas cuando sus centros distan menos que $\delta \cdot r$, donde δ es un factor arbitrario y r es un promedio de los circunradios. En la medida en que δ aumente, aumentará también la proporción de poliedros respecto a los símplexes.

En general, un valor de $\delta = 0.01$ es suficiente para garantizar que los nodos prácticamente coesféricos sean incorporados a un mismo elemento. De hecho éste es un parámetro que solo se modifica para realizar diversos experimentos numéricos, pero en los programas de cálculo cerrados permanece fijo en el valor antes citado. Con ese valor se garantiza la ausencia total de slivers en la malla y se eliminan todos los problemas de la triangulación estándar.

En los experimentos mencionados, se ha revelado que el factor de similaridad δ puede elevarse muy por encima de ese valor.

En los primeros análisis el cuidado estaba centrado en evitar la formación de poliedros cóncavos, pero hemos visto que éstos no ofrecen mayor dificultad en la medida en que el centroide del poliedro sea un punto desde el cual todos los nodos son visibles y los puntos de integración queden en el interior de la intersección de todas las esferas de los nodos del poliedro como se explicará más adelante.

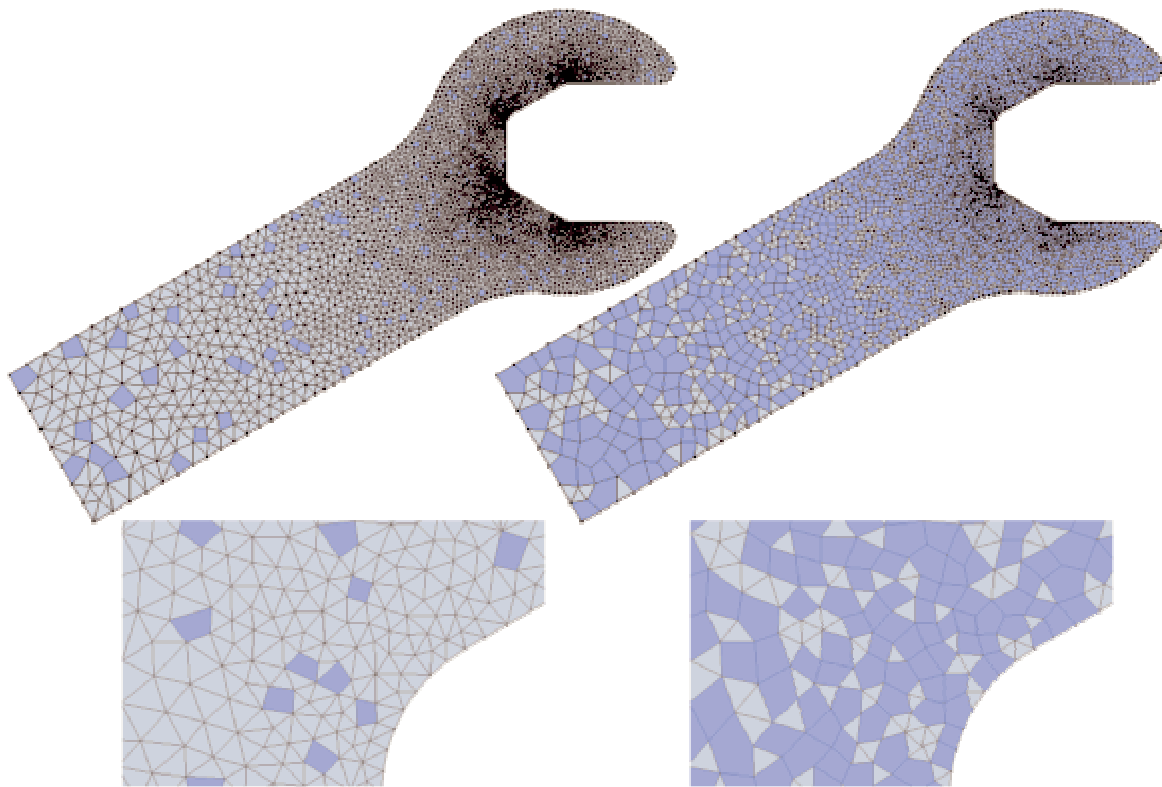


Figura 2: Efecto del aumento de δ en una poliedrización.

El límite geométrico para el crecimiento de δ llega cuando se unen todos los símlices de un nodo. Dicho nodo quedaría entonces en medio del poliedro y artificialmente despojado de todos sus elementos. Esa anomalía sucede recién para valores de δ cercanos a la unidad, pero por debajo de ese límite se pueden calcular en forma segura las funciones de forma y sus derivadas.

En la Figura 2, se puede ver una malla sencilla con densidad de nodos variable, los

polígonos no simpliciales se muestran en color más oscuro. La malla de la izquierda fue poliedrizada con un valor de δ 10 veces superior al habitual y a la derecha con un valor de 0.8, que ya puede ser considerado peligroso por la posible presencia de elementos cóncavos, pero aún así los resultados son aceptables. En una malla normal, con $\delta=0.01$, hay una mínima cantidad de poliedros, que se producen por la casual presencia de algunos nodos coesféricos. Al aumentar δ se forma una gran cantidad de poliedros no simpliciales e incluso llegan a ser mayoría, sin que la malla presente ningún problema de calidad.

3. ENTORNO DE UN NODO

Los elementos cuadriláteros/hexaédricos siempre han sido preferidos a los simpliciales, quizás por algunas razones no muy bien fundadas, pero es cierto que una misma densidad de nodos requiere muchos menos hexaedros que tetraedros. Además está el concepto de vecindad, dos nodos en diagonales en un cuadrilátero o un cubo no siempre son vecinos naturales en el sentido estándar (Delaunay), pero parece razonable que deben influenciarse mutuamente.

El entorno natural (natural neighborhood) de un nodo es la unión de las esferas de Voronoï del nodo. En algunos métodos sin puntos, como el Natural Element Method o NEM¹¹ se considera que un nodo influencia el valor de cualquier variable en los puntos de su entorno natural y que a su vez el nodo está influenciado por lo que sucede en su entorno natural. En particular, se llaman vecinos naturales de un punto al conjunto de nodos que definen las esferas de Voronoï que contienen al punto.

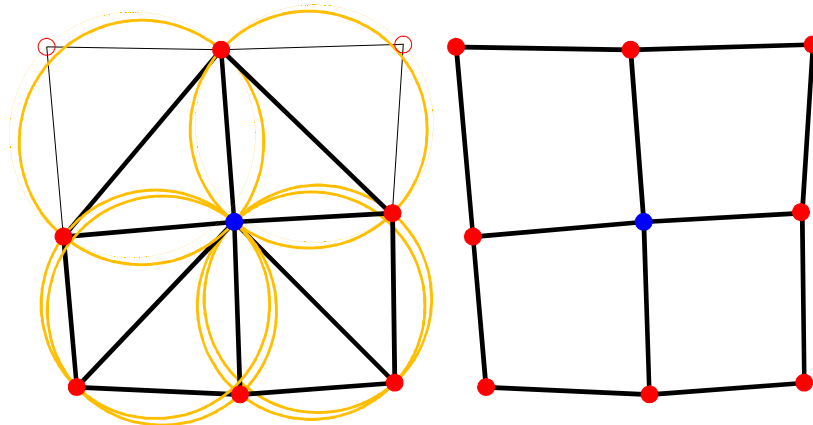


Figura 3: Entorno y vecinos de un nodo.

Para ejemplificar, la Figura 3 muestra un caso típico, los nodos marcados con un círculo hueco en la triangulación de la izquierda no son vecinos naturales del nodo central, puesto que no están definiendo ninguna esfera de Voronoï del nodo, aunque su influencia mutua con el nodo central debería ser similar a la de los otros nodos diagonales.

Esa discontinuidad de la influencia puede resultar nociva, una variable cualquiera que se asigne al nodo central a partir de sus elementos puede quedar mal evaluada debido a esa

disposición. Por ejemplo, si se quiere asignar una normal a cada nodo computando las normales a sus elementos, en una transición suave no habría mayor problema, pero si las dos aristas horizontales del medio fuesen parte de un quiebre de la geometría (parte de una arista geométrica) las normales asignadas de esa forma estarían mal calculadas debido al mayor peso de los cuatro triángulos inferiores frente a los dos de arriba.

En el Meshless Finite Element Method o MFEM¹², se utiliza un concepto distinto de vecindad definiendo como entorno de un punto al elemento que lo contiene y como entorno de un nodo a la unión de los elementos del nodo. Los vecinos de un punto cualquiera o de un nodo son los nodos de definición del entorno. Es decir que todos los nodos marcados en la poliedrización de la figura derecha serán correctamente considerados vecinos del nodo central y tendrán influencia mutua.

4. FUNCIONES DE FORMA E INTEGRACIÓN

Los primeros métodos basados en el concepto de entorno natural utilizaban funciones de forma Sibsonianas¹³, pero ya se vio que resulta mejor utilizar las coordenadas Laplacianas normalizadas^{14,15}, que resultan más fácilmente computables, sobre todo en tres dimensiones.

En el NEM, las funciones de forma en un punto están gobernadas por sus vecinos naturales, por lo tanto un nodo tiene influencia sobre cualquier punto de sus esferas de Voronoï. En contraste, en el MFEM, el soporte compacto de las funciones de forma está limitado al interior del conjunto de elementos que comparten un nodo. Esto simplifica (hace posible) la imposición de condiciones de contorno arbitrarias: Puesto que las funciones de forma están valuadas sólo en el interior del dominio (y no se “escurren” hacia afuera junto con las esferas de Voronoï), la imposición de condiciones de Dirichlet en los nodos es perfectamente posible.

Otra ventaja de la poliedrización se observa al integrar las funciones de forma y sus derivadas.

La presencia de abundante cantidad de slivers en la teselación Delaunay impide la utilización de los símlices originales para la integración en el poliedro. En su lugar se recurre a una división del poliedro en símlices formados con las caras y un punto interior, que puede ser el centroide del poliedro. Para integrar se utiliza un punto de integración en el centro de cada uno de esos símlices. Por eso es que decíamos antes que el centroide del poliedro debe ver a todos los nodos. Los puntos de integración deben estar en el interior de la intersección de todas las esferas de Voronoï de los nodos, esto es si pretendemos conservar la convexidad de las funciones de forma, pero no es en absoluto grave si se viola esta condición.

En algunas aplicaciones numéricas, es necesario iterar en cada paso de tiempo sin modificar las conectividades para no perder la continuidad de las funciones de forma. Resulta ser que un poliedro soporta las deformaciones mucho mejor que una triangulación equivalente.

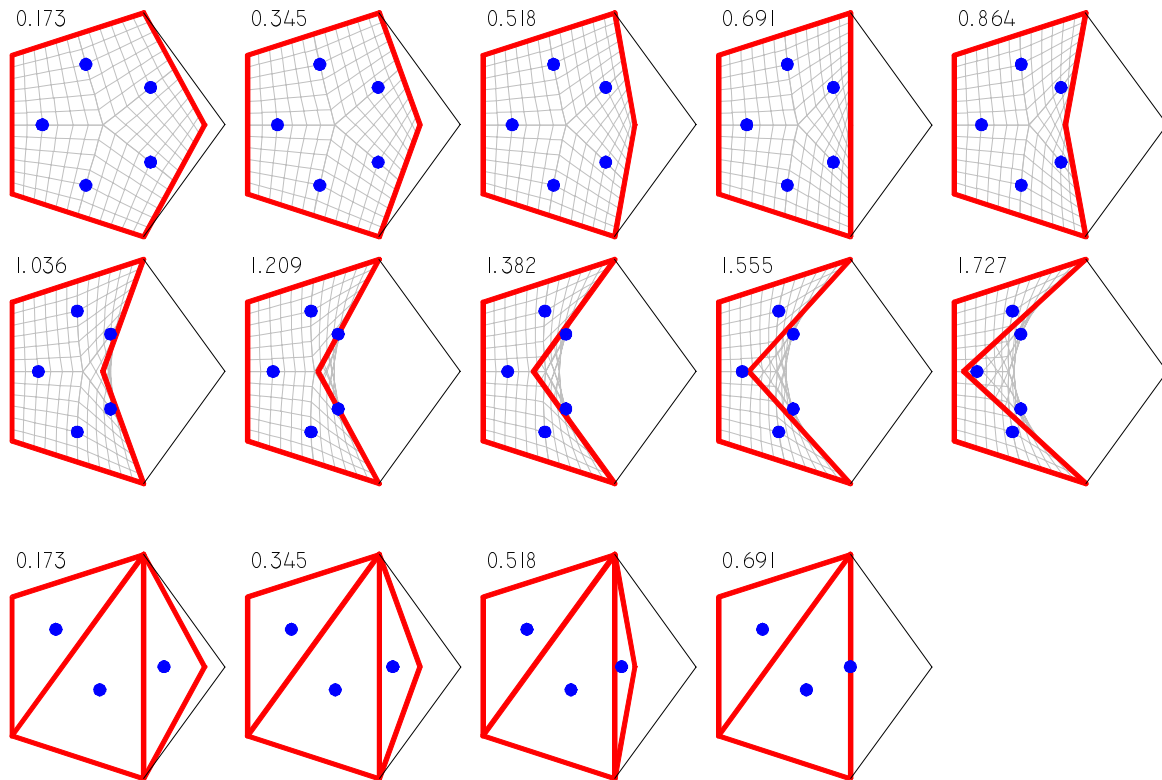


Figura 4: Puntos de integración durante la deformación de un elemento.

En la Figura 4 se puede observar la secuencia de un polígono deformándose por el movimiento hacia la izquierda del nodo extremo derecho. Los números indican el desplazamiento del nodo en unidades del radio del elemento y los puntos marcados son los puntos de integración. En una triangulación equivalente, tal como se muestra debajo, el elemento estaría dividido en triángulos, y si por casualidad hubiese un triángulo formado con los tres nodos de la derecha, el Jacobiano quedaría enseguida inválido, por el aplastamiento de dicho triángulo.

El polígono, en cambio, soporta muy bien la deformación, puesto que el Jacobiano sigue siendo positivo en los puntos de integración aún cuando el poliedro es cóncavo y hasta un punto intermedio entre los dos últimos pasos de la secuencia. Como se puede observar si se analiza la grilla métrica indicada como fondo, el Jacobiano local en los puntos de integración se revierte casi al final de la secuencia. En la práctica, los pasos de tiempo son adaptados de acuerdo a la divergencia de la velocidad para evitar llegar tan lejos, pero se puede apreciar la superior robustez de los poliedros frente a los símplices en ésta situación.

5. FRONTERA DE UN CONJUNTO DE PUNTOS

A diferencia del problema de la generación de una malla dentro de una superficie preestablecida desde el CAD, la frontera de un conjunto de puntos no es ni siquiera resultado

matemáticamente bien definido. En la Figura 5 se muestra en un conjunto de puntos a modo de ejemplo, en este caso es un paso de tiempo intermedio del problema de un chorro de líquido llenando un recipiente.

La única frontera bien definida para un conjunto de puntos arbitrario es el envoltorio convexo (convex-hull), cuyo interior es la unión de todos los semiespacios que contienen puntos del conjunto. La frontera de la triangulación Delaunay del conjunto de puntos es el convex-hull.

Si se eliminan todos los elementos cuya esfera tenga un radio mayor que cierto parámetro real α , se obtiene una malla cuya frontera se denomina α -shape del conjunto de puntos dado¹⁶.

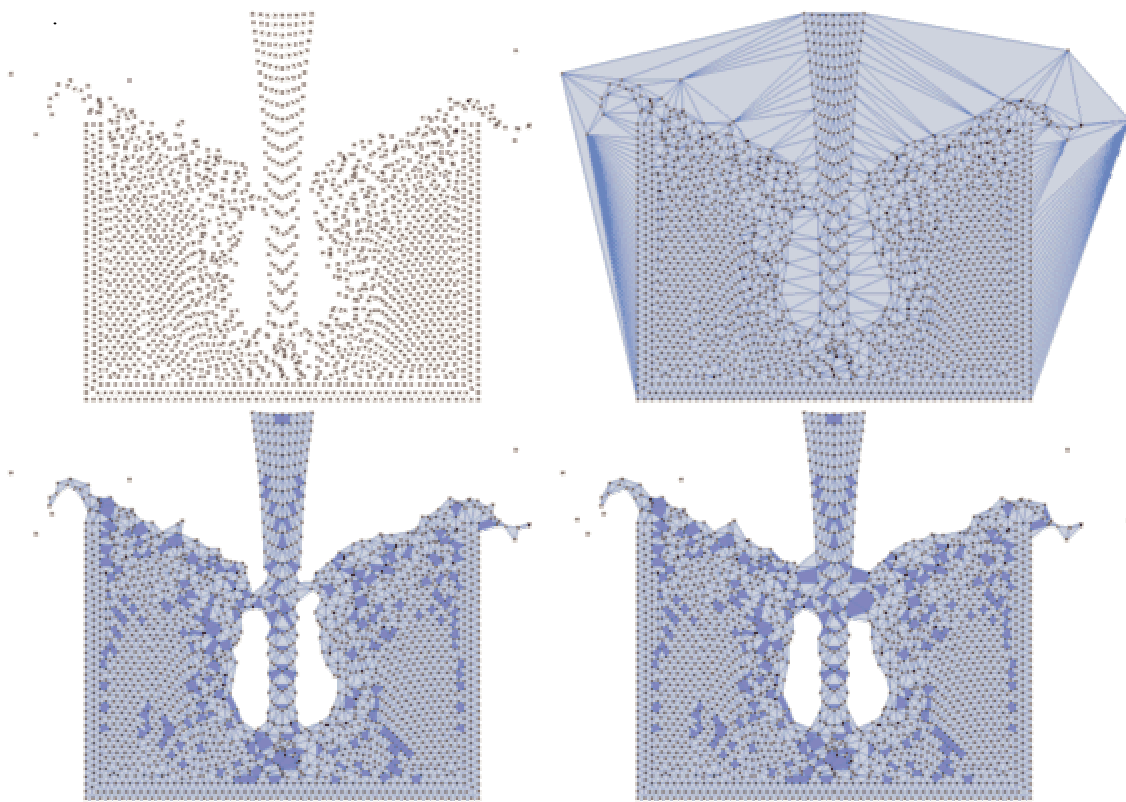


Figura 5: Frontera de una nube de puntos.

En la parte inferior de la figura se muestran los resultados obtenidos con dos valores de α distintos. Como se puede observar, existen puntos que quedan aislados y también aparecen huecos en el dominio. Cualitativamente, ambos resultados se corresponden en forma aceptable con la física del problema.

En elementos finitos se suele utilizar $h(\mathbf{x},t)$ para representar el valor requerido para la distancia entre nodos vecinos en un punto del espacio y en cada paso de tiempo. Los nodos de ese problema en particular deberían tener una distribución uniforme y constante; pero el movimiento, guiado por las ecuaciones del continuo, produce una distribución variable. En el

seno del líquido, la densidad de la distribución es aproximadamente la requerida, pero en las cercanías de los huecos y de los nodos aislados aparece una brusca variación de la densidad de puntos.

El valor de α está íntimamente ligado a la densidad de puntos, se pretende que el algoritmo de α -shape capture esas variaciones de densidad y reconozca esas zonas de alto gradiente como frontera. Comparando las dos figuras inferiores, se puede ver que distintos valores de α generan fronteras distintas, pero aceptables en la medida en que los valores de α sean del orden de h .

También ligada con α está la curvatura de la superficie, puesto que α mide el radio de la esfera más grande que admite el dominio. Con un valor infinito para α se obtiene como frontera el envoltorio convexo de los nodos. Con valores de α un poco menores que h se generan huecos internos o burbujas. Cuando α adquiere un cierto valor límite menor que h , desaparecen todos los elementos.

Cuando se tiene una densidad de puntos intencionalmente variable en el seno del dominio, la definición original no sirve. Un valor de α similar al h máximo cerraría artificialmente las concavidades de la geometría en las zonas de alta densidad, y por el contrario, uno similar al h menor dejaría huecos artificiales en la zona de grandes elementos. Para poder trabajar sobre conjuntos de puntos con densidad no uniforme, α debe considerarse como un factor (próximo a la unidad) que multiplica al h variable.

En resumen, el algoritmo de definición de la frontera consiste en un recorrido por la lista de elementos (ya sean simpliciales o poliédricos) y, cuando la esfera correspondiente al elemento tiene un radio mayor que $\alpha \cdot \langle h \rangle$, sus nodos se marcan como frontera y el elemento se elimina de la malla. La única consideración especial debe hacerse sobre el $h(\mathbf{x}, t)$ que se usa como comparador: Puesto que el centro de la esfera puede estar arbitrariamente alejado de los nodos (al menos en los nodos de la frontera), se toma para el elemento el h promedio de sus nodos.

Con esto se obtiene una frontera adecuada a la densidad de puntos y sin los trastornos de la recuperación de la frontera¹⁷ que presentan los métodos clásicos de mallado.

6. CONCLUSIONES

La poliedrización resulta ser una herramienta que permite combinar la velocidad y simplicidad de la teselación Delaunay con las ventajas de los elementos cuadriláteros o hexaédricos en un tiempo razonable y en forma robusta.

La poliedrización tiene además las ventajas de aceptar una mayor deformación por movimiento de los nodos, conservando el gradiente de las funciones de forma dentro de límites aceptables, del orden del gradiente esperado de acuerdo a la densidad de la distribución.

La superficie de la malla se obtiene en forma muy rápida y sencilla; aún con densidad variable y capturando en forma adecuada la geometría del dominio, sea éste cóncavo o convexo.

7. REFERENCES

- [1] A. Bowyer Computing, "Dirichlet Tessellations." *Comp. J.* **24**(2), 162–166 (1981).
- [2] D.F. Watson, "Computing the n-dimensional Delaunay Tessellation with Application to Voronoi Polytopes." *Comp. J.* **24**(2),167–172 (1981).
- [3] P.L. George and H. Borouchaki, "Delaunay triangulation and meshing: application to finite elements." Hermes Sciences Publications (1998).
- [4] J.R. Shewchuk, "Lecture Notes on Delaunay Mesh Generation.", citeseer.nj.nec.com/shewchuk99lecture.html
- [5] M. Bern and P. Plassmann, "Mesh Generation" in *Handbook of Computational Geometry*. Elsevier Science (2000)
- [6] H Edelsbrunner and G. Damrong, "An Experimental Study of Sliver Exudation." *Proceedings, 10th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories*, pp.307-316, October 7-10 (2001).
- [7] R. Lohner, "Progress in grid generation via the advancing front technique." *Engng. Comp.*, **12**, 186-210 (1996)
- [8] 11th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, Birds of a Feather Sessions: Volume Meshing, <http://www.imr.sandia.gov/11imr/bofnotes.htm#vol>
- [9] N.A. Calvo and S.R. Idelsohn, "All-hexahedral mesh smoothing with a node based measure of quality.", *Int. J. Num. Meth. Engng*, **50**, 1957-1967 (2001).
- [10] S.R. Idelsohn, N. Calvo and E. Oñate, "Polyhedrization of an arbitrary 3D point set", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, **192**/22-24, 2649 - 2667 (2003)
- [11] N. Sukumar, B. Moran, A.Yu. Semenov, V. V. Belikov, "Natural neighbour Galerkin Methods", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **50**, 1-27 (2001).
- [12] S. Idelsohn, E. Oñate, N. Calvo and F. Del Pin. "The meshless finite element method". *Int. J. Num. Meth. Eng.* **59**(6), 893-912, (2003).
- [13] R. Sibson "A vector identity for the Dirichlet Tessellation.", *Math. Proc. Cambridge Phil. Soc.* **87**(1): 151-155 (1980).
- [14] H. Hiyoshi and K. Sugihara, "Improving continuity of Voronoi-based interpolation over Delaunay spheres", *Comp. Geom.* **22**,167-183 (2002)
- [15] V. Belikov and A. Semenov, "Non-Sibsonian interpolation on arbitrary system of points in Euclidean space and adaptive generating isolines algorithm.", *Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation, Proc. of the 6th Intl. Conf. Greenwich Univ.* July 1998.
- [16] H. Edelsbrunner and E.P. Mücke, "Three-dimensional alpha shapes", *ACM Trans. Graph.* **13**, 43-72 (1994).
- [17] J.R. Shewchuk, "Constrained Delaunay Tetrahedralizations and Provably Good Boundary Recovery." 11th International Meshing Roundtable (Ithaca, New York), pages 193-204, Sandia National Laboratories, September 2002.