

Mecánica de fluidos computacional: tipos de mallas y calidad del mallado

Apellidos y nombre: García-Cuevas González, Luis Miguel (luiga12@mot.upv.es)¹

Gil Megías, Antonio (angime@mot.upv.es)¹
Navarro García, Roberto (ronagar@mot.upv.es)¹
Quintero Igeño, Pedro Manuel (pedquiig@mot.upv.es)¹

Departamento/Centro: ¹Departamento de Máquinas y Motores Térmicos

Universitat Politècnica de València



Índice general

1.	Resumen de las ideas clave	2						
2.	Objetivos	2						
3.	Introducción	2						
4.	Desarrollo	3						
	4.1. Mallado estructurado y no estructurado	3						
	4.2. Mallas híbridas y por bloques	4						
	4.3. Mallas móviles, deformadas y quimera	5						
	4.4. Asegurando la calidad de la malla	5						
5.	Cierre	8						
Bil	Bibliografía 9							



1 Resumen de las ideas clave

En este artículo vamos a presentar los principales tipos de mallas utilizados en problemas de mecánica de fluidos computacional mediante la aproximación de volúmenes finitos. Se describen las mallas estructuradas y no estructuradas, mallas por bloques, mallas móviles y deformables, mallas quimera o los tipos de celdas utilizados. Además, vamos a dar algunas pinceladas sobre cómo se puede asegurar la calidad de las mismas, incluyendo una descripción de los métodos estándar para definir el índice de convergencia de una malla.

2 Objetivos

Tras leer detenidamente este documento, el lector ha de ser capaz de:

- Reconocer los principales tipos de mallas usados en problemas de mecánica de fluidos computacional resueltos mediante el método de los volúmenes finitos.
- Describir las ventajas e inconvenientes principales de cada uno de estos tipos de mallas.
- Describir criterios objetivos para asegurar la calidad de las mallas.

3 Introducción

En el método de los volúmenes finitos aplicado a la mecánica de fluidos computacional se utilizan diveros algoritmos y aproximaciones para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Entre otros, se encuentran:

- La forma de propagar la solución en el tiempo, usando métodos de integración temporal estándar como los métodos explícitos multipaso o los métodos implícitos para la resolución de ecuaciones rígidas.
- La aproximación para resolver el problema de la turbulencia: con simulación numérica directa (*Direct Numerical Simulation*, DNS), realizando un filtrado espacial (*Large Eddy Simulation*, LES) o realizando un promediado temporal a la Reynolds (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations*, RANS), así como combinaciones de las mismas *Detached Eddy Simulation*, DES, por ejemplo).
- En los casos en los que la turbulencia no se resuelve por completo hasta la escala de Kolmogorov, la forma en la que se modelan las escalas no resueltas, con el caso más extendido de los modelos basados en la hipótesis de viscosidad turbulenta de Boussinesq.
- La aproximación para la resolución de las ecuaciones, partiendo del límite incompresible con los métodos de corrección de presión como el PISO o el SIMPLE o los métodos acoplados de resolución basados en densidad que resuelven de forma aproximada de una manera u otra el problema de Riemann entre celdas (métodos FDM o FVM como derivados de Roe o los tipo AUSM).

Pero hay algunos aspectos más a tener en cuenta: tales son la forma en la que se realiza el mallado o cómo se estima la calidad del mismo.

En la sección 4 se van a plantear estas últimas cuestiones. En la sección 5 se resumen las principales ideas descritas en este documento.



4 Desarrollo

En esta sección se mostrarán primero, en la subsección 4.1, las principales aproximaciones para el mallado: los casos estructurado y no estructurado. Después, se planteará la posibilidad de mallar por bloques en la subsección 4.2. También se describirán otros tipos de mallas en la subsección 4.3. Por último, se describirán las figuras de mérito que se pueden utilizar para asegurar la calidad de la malla en la subsección 4.4.

4.1 Mallado estructurado y no estructurado

Empecemos con un sencillo dominio unidimensional como el de la figura 1. Se ha dividido en cierto número de celdas: cada una de ellas está conectada a cada lado con otra o con una de las dos condiciones de contorno. En esta situación, es muy sencillo usar una ordenación trivial de las celdas, haciéndolo de forma que la celda i tenga a un lado a la celda i-1 y al otro a la celda i+1. De ese modo, la conectividad entre celdas (y elementos del vector de estado) se obtiene directamente de la posición en memoria de los vectores en los que se guarda la información: el elemento i del vector de estado, correspondiente a la celda i, estará afectado seguramente por las celdas cercanas, cuya información se almacena en los elementos i-1 e i+1. Si la conectividad es trivial, no hace falta realizar complejos cálculos para obtenerla ni guardarla en otro lugar, ocupando un precioso espacio en la memoria de la máquina: jestá implícita en la distribución en memoria de los vectores que se utilizan en el cálculo!

1	2	3	4	5

Figura 1: Mallado estructurado en un dominio unidimensional. Los números indican el número de celda.

En un caso bidimensional, el proceso se complica un poco más, pero tampoco mucho, tal y como se ve en la figura 2a. De nuevo, es muy sencillo obtener la conectividad entre celdas sabiendo el número que hay en una dirección y en otra. En un caso tridimensional, por supuesto, el problema es análogo. Las celdas tienen forma de cuadriláteros en un caso bidimensional, y forma de hexaedros en un caso tridimensional. A este tipo de mallas las llamamos *mallas estructuradas*.

6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

(b) Mallado no estructurado en un dominio bidimensional. Los números indican el número de celda.

Figura 2: Mallas estructuradas y no estructuradas.

Cuando la conectividad no es trivial, las mallas son *no estructuradas*. En este caso, es necesario calcular la información de conectividad entre celdas y guardarla en algún tipo de estructura de datos, lo que hace el cálculo menos eficiente (¡como poco, aumenta el uso de memoria!). Un ejemplo de *malla no estructurada* está en la figura 2b. Como se ve, la malla tiene la misma forma que en la figura 2a, pero ahora la conectividad no es trivial.

¿Y cómo se elige entre un tipo de malla u otro? Desde luego, las *mallas estructuradas* parecen tener ciertas ventajas, pero tienen un problema fundamental: no es trivial adaptarlas a geometrías muy complejas. De hecho, una *malla estructurada* solo se puede utilizar, en principio, alrededor de una geometría que sea convertible, deformándola de forma continua, en un rec-

 <sup>10
 4
 8
 9
 2

 6
 1
 3
 7
 5</sup>

⁽a) Mallado estructurado en un dominio bidimensional. Los números indican el número de celda.



tángulo (en el caso bidimensional) o en un hexaedro (en el caso tridimensional), como se ve en la figura 3.

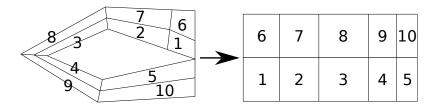


Figura 3: Conversión por deformación continua de un dominio cualquiera a un dominio equivalente rectangular.

El proceso de mallado en *mallas estructuradas* es lo suficientemente complejo como para que requiera de mucha interacción humana, lo que reduce también su utilidad: si el tiempo de ingeniería humana es más caro que el tiempo de máquina, es interesante que la máquina realice todo el proceso. En el caso de las *mallas no estructuradas*, el proceso de mallado es, en general, mucho más automático.

Las mallas estructuradas, bien hechas, pueden dar lugar a mejor convergencia y precisión que las mallas no estructuradas, aunque esto no es necesariamente cierto en todos los casos.

Además, las *mallas no estructuradas* pueden estar formadas por elementos de formas mucho más diversas: en dominios bidimensionales la forma básica es la de triángulos y en tridimensionales se usan tetraedros, aunque de forma práctica se suelen usar mallas más complejas formadas por poliedros.

4.2 Mallas híbridas y por bloques

No es necesario que el mallado en todo el dominio se haga con el mismo tipo de malla: de hecho, se puede *mallar por bloques* y tener *mallas híbridas*, incluso con bloques estructurados y bloques no estructurados. O se puede rodear una geometría muy compleja mediante múltiples bloques estructurados. Las interfaces entre estos bloques pueden ser de dos tipos:

Conformes: Las caras y nodos de caras entre celdas a un lado y a otro de la interfaz coinciden, como en la figura 4a.

No conformes: Las caras y nodos de caras entre celdas a un lado y a otro de la interfaz no coinciden y hace falta interpolar la solución de flujos a uno y otro lado de la interfaz, lo que puede llegar a dar problemas de precisión, convergencia y conservación de las variables conservativas. Es el caso de la figura 4b.

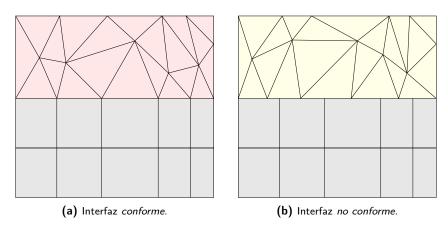


Figura 4: Interfaces conformes y no conformes entre bloques de mallado.



Parece muy interesante realizar estas interfaces de modo *conforme*, pero no siempre es posible. Para adaptar las celdas de un bloque a las del otro, se puede optar por tener unas capas de transición con formas especialmente adaptadas a este efecto, como pirámides para pasar de una *malla no estructurada* a una *malla estructurada*. Otros casos son básicamente imposibles de solucionar así: es el caso en el que una malla desliza sobre la otra, que puede ser útil para simular movimientos relativos entre partes del dominio como los que pueden darse en simulaciones de turbomaquinaria o palas de helicópteros y aerogeneradores.

4.3 Mallas móviles, deformadas y quimera

Cuando el dominio ha de moverse, es posible hacer que la malla o parte de la misma lo haga, desplazándose y girando. También existe la posibilidad de deformar la malla o, incluso, deformar el dominio y remallar. Otro método muy popular es el de utilizar dos mallas superpuestas, en lo que viene a llamarse malla quimera o malla overset. En este caso, las dos mallas pueden desplazarse y girar de forma independiente. La solución se calcula en una u otra malla, interpolando la misma cuando es necesario. Se puede ver un ejemplo en la figura 5. Este método es muy útil para simular problemas en los que un sólido se mueve en el dominio fluido debido a la interacción con el mismo, como es el caso de problemas aeroelásticos.

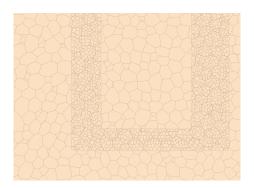


Figura 5: Dos mallas superpuestas en configuración quimera u overset.

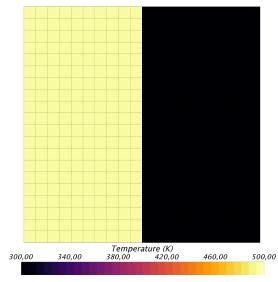
4.4 Asegurando la calidad de la malla

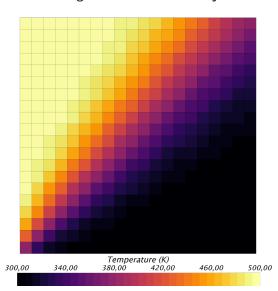
Es muy importante mantener la suficiente calidad en el mallado. Para ello, es preciso fijarse en lo siguiente:

- No suele ser buena idea que las celdas cambien muy bruscamente de tamaño. La distancia entre nodos consecutivos debería crecer de forma lenta, normalmente no más de un 20 o 30 % (jaunque siempre hay excepciones!). Naturalmente, cuanto más despacio crezca la malla más precisión habrá en el cálculo, pero también será mayor el coste computacional.
- No suele ser buena idea que las celdas estén muy alargadas. Dependiendo de las características del flujo y sus gradientes, esto puede querer decir que el alargamiento típico ha de estar en torno a la unidad o que se pueden permitir valores más cercanos a la decena o superiores. De nuevo, jdepende del caso!
- Las celdas no deberían estar muy deformadas. Hay multitud de formas de definir esta deformación: dependiendo del código que se utilice, se medirá de una forma u otra. La medida de deformación suele basarse en los ángulos máximos y mínimos formados por las esquinas, y suele ser necesario evitar valores elevados de la misma. En el caso de celdas hexaédricas, un valor máximo típico de la deformación (skewness) puede ser 0,85. De nuevo, siempre hay que consultar qué se está usando para definir este parámetro y su rango típico. Lo mejor es, en todo caso, que la mayor parte de las celdas tenga un valor de deformación mucho menor.



- Las celdas deberían ser finas en las capas límites, manteniendo el criterio de tamaño según distancia adimensional y⁺ del método que se esté usando. También deberían ser pequeñas en otras zonas, como es cerca de ondas de choque u otras discontinuidades y fuertes gradientes. Puede ser gruesa en otras partes del dominio que se espere que vayan a afectar poco a la zona en la que se desea obtener la solución más detallada.
- Las celdas deberían estar razonablemente bien orientadas según las direcciones del flujo. Si el campo de velocidades lleva una dirección en una zona, se consiguen los mejores resultados si hay caras de las celdas que son más o menos perpendiculares a dicha dirección. Que los flujos vayan muy oblicuos a las caras entre celdas suele dar problemas de difusión numérica elevada, como se ve en la figura 6a y figura 6b. Este es uno de los principales motivos por los que se prefieran mallas poliédricas en vez de tetraédricas al mallar en tres dimensiones, a pesar del mayor tiempo de cálculo necesario para la generación de la malla. También es el motivo por el que es buena idea mallar las capas límites con capas de celdas prismáticas, con caras muy bien orientadas según la dirección del flujo.





(a) Mallado bien orientado. Hay un campo de velocidades vertical que va desde abajo hacia arriba. La condición de contorno inferior está dividida en dos: al lado izquierdo presenta una temperatura de 500 K y, al lado derecho, la temperatura es de 300 K. No aparece difusión, lo que coincide con el problema físico que se está resolviendo.

(b) Mallado mal orientado. Hay un campo de velocidades diagonal que va desde la esquina inferior izquierda a la superior derecha. La condición de contorno izquierda tiene una temperatura de 500 K, mientras que en la de abajo es de 300 K. La fuerte difusión de este caso es espuria.

Figura 6: Solución de un problema convectivo plano puro con resolución de primer orden con un mallado bien orientado y otro mal orientado.

¿Cómo de fino ha de mallarse? En general, el proceso es bastante más artesanal de lo que cabría esperar y se suelen poder hacer estimaciones iniciales bastante acertadas a partir de la experiencia previa. A pesar de ello, es muy interesante (jy tendría que ser obligatorio en muchos casos!) realizar un estudio de independencia del tamaño de la malla para comprobar que la malla es lo suficientemente fina. Para ello, se puede observar alguna variable de la solución, llamémosla w, y comprobar cómo varía con distintos tamaños de malla. Si la malla es lo suficientemente fina, se tendrá que

$$w(h) = w(0) + C \cdot h^p + o(h)^p$$
 (1)

donde w(h) es la solución para un tamaño de malla h, w(0) es la solución en el límite asintótico de malla infinitesimalmente fina, p es el orden de convergencia global de la solución y C es una constante. Usando varias mallas, es posible obtener el valor de p (y, si se quiere, de C), pudiéndose así estimar el valor de la solución para mallas infinitesimalmente finas a partir de



mallas más gruesas. A este procedimiento se le llama *extrapolación de Richardson* (en realidad, es una generalización de la misma).

Las buenas prácticas, además, establecen el uso de lo que se llama Grid Convergence Index (GCI), tal y como se ve en Roache 1998. El GCI se puede obtener de la Ecuación 2 cuando se usa la solución de una malla fina o de la Ecuación 3 cuando se usa la solución de una malla gruesa. En estas ecuaciones, r es la relación entre el tamaño de la malla gruesa y el tamaño característico de la malla fina y ϵ es la estimación del error relativo de la solución, que se puede obtener como la diferencia entre la solución fina y la solución gruesa dividida entre la solución fina. Se multiplica por un factor de seguridad F que suele tomarse como 3 (a veces como 1,25, cuando se usan muchos tamaños de malla para estimar el orden de convergencia p). El GCI se suele expresar en tanto por ciento, y permite también estimar qué tamaño de malla sería necesario para obtener una solución de cierta calidad, a partir de las mallas que ya se han probado. Suele calcularse para algún caso que se quiera simular y, después, simular otros casos similares suponiendo que se tiene el mismo GCI.

$$GCI_{\text{fine}} = \frac{F \cdot |\epsilon|}{r^p - 1}$$
 (2)

$$GCI_{\text{coarse}} = \frac{F \cdot |\epsilon| \cdot r^p}{r^p - 1} \tag{3}$$

Las distintas mallas suelen variar en tamaño de forma fija: suele ser habitual probar con mallas un $50\,\%$ más gruesas y un $50\,\%$ más finas. La figura 7 esquematiza este proceso: se ha supuesto que el valor asintótico de la variable w es el marcado para h=0 en rojo intenso. Los otros puntos, en rojo semitransparente, indican resultados de simulaciones, que se ajustan bien a una curva polinómica de orden p, pues están en el rango asintótico de convergencia, y se han obtenido con diversos valores de h elegidos de forma probablemente subóptima. El punto azul representa el resultado de una simulación en el que la malla era demasiado gruesa y no capturaba parte de los fenómenos a tener en cuenta, por lo que queda fuera del rango asintótico.

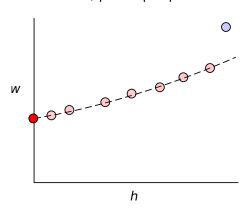


Figura 7: Resultados típicos de un estudio de independencia de malla, con extrapolación generalizada de Richardson para obtener el resultado asintótico para malla infinitesimalmente fina. Se muestra un punto con una malla demasiado gruesa que queda fuera del rango asintótico.

Se puede encontrar un ejemplo interesante de cálculo del GCI en NASA 2008. El libro de Versteeg y Malalasekera (2007) también contiene información interesante sobre este y otros temas.



5 Cierre

A lo largo de este objeto de aprendizaje hemos visto las principales características de las mallas y un criterio objetivo para asegurar la calidad de las mismas:

- Las mallas puedes dividirse en dos grandes grupos: estructuradas y no estructuradas.
- Sobre las mallas *estructuradas*:
 - Las celdas están ordenadas y tienen una conectividad regular y trivial.
 - Este tipo de mallas es muy eficiente: la conectividad se define directamente por la posición de los elementos en los vectores donde se guarden: en 1D, dos elementos están conectados si están juntos en el vector en memoria.
 - En 2D, las celdas son cuadriláteros. En 3D, son hexaedros.
 - Para un mismo número de celdas y una misma calidad de malla, las mallas estructuradas proporcionan mejor convergencia y mejor precisión que las mallas no estructuradas.
 - Son difíciles de generar para geometrías complejas, y requieren de mucha interacción humana.
- Sobre las mallas *no estructuradas*:
 - Son mallas irregulares, con conectividad entre celdas no trivialmente obtenible a partir del orden de almacenamiento de los elementos en memoria.
 - El coste computacional asociado es mucho mayor que con mallas estructuradas para una misma precisión en los resultados.
 - Se suelen usar triángulos en 2D y tetraedros en 3D, aunque pueden usarse también otros elementos con un número arbitrario de caras (poliedros).
 - Son fáciles de generar de forma automática. A nivel práctico, en geometrías muy complejas pueden dar mejor resultado que las mallas estructuradas, por lo complicado de realizar un mallado estructurado de alta calidad.
- Las mallas no tienen por qué ser del mismo tipo en todo el dominio. Se puede mallar por zonas, generando distintas mallas estructuradas y no estructuradas según convenga: mallas híbridas.
- Es incluso posible generar una malla en distintas zonas o bloques en las que todas las particiones sean estructuradas o todas sean no estructuradas.
- Las mallas híbridas *no tienen por qué ser conformes*: en las fronteras entre bloques, los nodos no tienen por qué coincidir. En un ejemplo sencillo de entender, a un lado de la frontera entre bloques puede haber 5 celdas y en el otro puede haber 6.
- Si se quiere mantener una unión conforme al pasar de malla estructurada a no estructurada, es posible usar poliedros de distintos tipos. Por ejemplo, se podrían usar pirámides de base cuadrilátera para unir una malla no estructurada a una estructurada con hexaedros.
- Se pueden usar mallas en bloques para mallar eficientemente en zonas según la complejidad de la geometría, o porque en algunas zonas del dominio haya que deformar la malla o usar una malla móvil, por ejemplo. Es incluso posible superponer mallas: es el caso de las mallas overset o quimera.



- Es muy importante mantener una buena calidad de malla. En general:
 - El cambio de tamaño de las celdas tiene que ser suave. No se debería cambiar órdenes de magnitud el tamaño entre celdas contiguas.
 - El alargamiento de las celdas no puede ser excesivo (salvo que las características del flujo lo permitan, por supuesto).
 - Las celdas no pueden estar muy deformadas. Hay múltiples formas de medir la deformación, aunque se suelen basar en los ángulos máximos y mínimos formados por las esquinas. Según la definición usada para el parámetro de deformación (skewness), el límite apropiado suele ser mayor o menor. Hay que evitar valores elevados del parámetro (alrededor de 0,85 para celdas hexaédricas). La mayor parte de las celdas de la malla tendrían que tener valores mucho menores.
- La malla ha de ser fina en ciertas zonas (capas límites, ondas de choque, zonas con gradientes grandes en el vector de estado). Puede ser gruesa en otras zonas, para reducir el coste computacional.
- Que se obtenga una solución convergida no quiere decir que se obtenga una solución precisa: es necesario hacer un estudio de convergencia de malla (o independencia de malla) para comprobar que el tamaño de la misma no está influyendo en la solución. El proceso típico es:
 - Mallar con tamaño base y resolver el problema.
 - Mallar con un 50% más de tamaño de celdas y resolver el problema.
 - \bullet Remallar con un 50 % menos de tamaño de celdas respecto al tamaño base y resolver el problema.
 - ullet Comparar soluciones. Si son casi iguales, se ha alcanzado la convergencia y se puede usar el tamaño base. Si no, usar como tamaño base un tamaño un $50\,\%$ menor y volver a iterar. Es muy recomendable utilizar la extrapolación de Richardson y el GCI durante todo este proceso.
- La idea general es utilizar el tamaño máximo de malla que permita resolver el problema.
- Hay limitaciones en el tamaño que hay que respetar en algunas zonas: tal es es caso de las paredes cuando los modelos de turbulencia exigen un y^+ determinado.

Bibliografía

NASA (2008). Examining Spatial (Grid) Convergence. URL: https://www.grc.nasa.gov/ WWW/wind/valid/tutorial/spatconv.html (vid. pág. 7).

Roache, P.J. (1998). Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. Albuquerque, New Mexico, Estados Unidos: Hermosa Publishers (vid. pág. 7).

Versteeg, H.K y W. Malalasekera (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics:* the Finite Volume Method. eng. 2.ª ed. Person Education. ISBN: 978-0-13-127498-3 (vid. pág. 7).