



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Sustento teórico de la APP MallaPy_2D V.1.0

Autores:

Iván Eduardo Beltrán González

Víctor Leonardo Teja Juárez



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2024

Antes de comenzar

Los autores declaran que la mayoría de este texto fue extraído del trabajo: “*Desarrollo de un Software para la Generación de Mallas Estructuradas no Ortogonales con Aplicación a la Simulación Matemática de Yacimientos*” presentado por Iván Eduardo Beltrán González como trabajo de titulación por desarrollo de material didáctico. Si el lector desea profundizar sobre la construcción de la APP mallaPy_2D y sus posibles aplicaciones, se recomienda la lectura de dicho material. Enlace:

<http://www.ptolomeo.unam.mx:8080/xmlui/handle/RepoFi/18070>

Generación de mallas estructuradas en 2D

En este documento se abordan los conceptos teóricos relacionados a la generación de mallas estructuradas en 2D, de igual manera, se hace énfasis en dos métodos para generar este tipo de mallas. El primero es la Interpolación Transfinita y el segundo, el método de coordenadas de cuerpo ajustado que implementa ecuaciones diferenciales elípticas (Thomson, Soni, & Weatherill, 1999).

Mallas estructuradas

Una malla se define como la representación discreta de un medio continuo (dominio). Las mallas se componen por nodos y elementos. Éstas se pueden clasificar en: **Estructuradas y no estructuradas**.

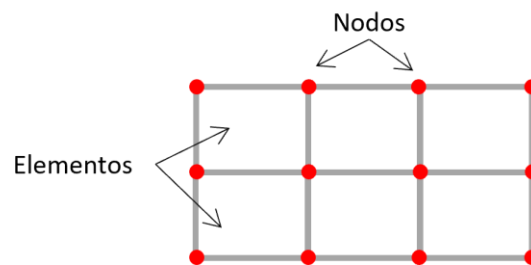


Figura 1. Ejemplo de malla. Modificado de (google.com)

Las mallas estructuradas son mallas con conectividad implícita que siguen un patrón reticular donde los nodos y elementos son fáciles de identificar. Los elementos de este tipo de mallas, por lo regular, tienen forma de cuadriláteros (2D) y hexaedros (3D).

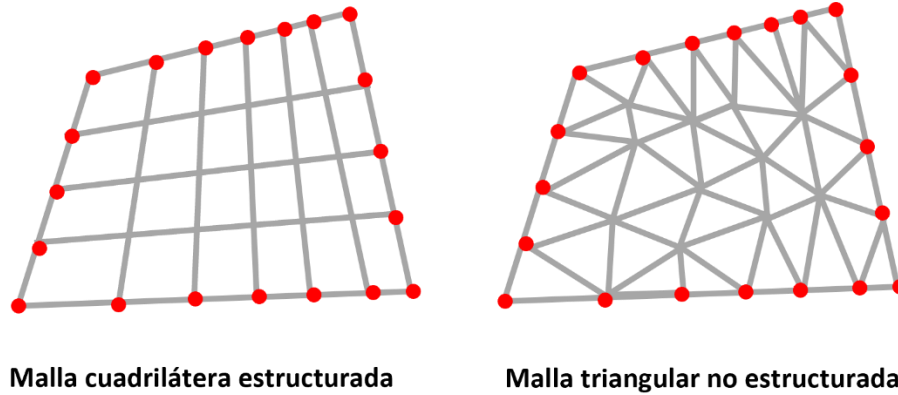


Figura 2. Ejemplo de mallas numéricas. Modificado de (Colchado, 2022)

Las mallas estructuradas son preferibles para la implementación de códigos desarrollados que impliquen ya sea diferencias o volúmenes finitos, puesto que al aplicar las mismas, las matrices de coeficientes que se generan quedan con una estructura bien definida.

Métodos para generar mallas estructuradas en 2D

Existen distintos métodos de mallado estructural. Los más comunes son los algebraicos y los basados en ecuaciones diferenciales. A continuación, se mencionan algunos de ellos.

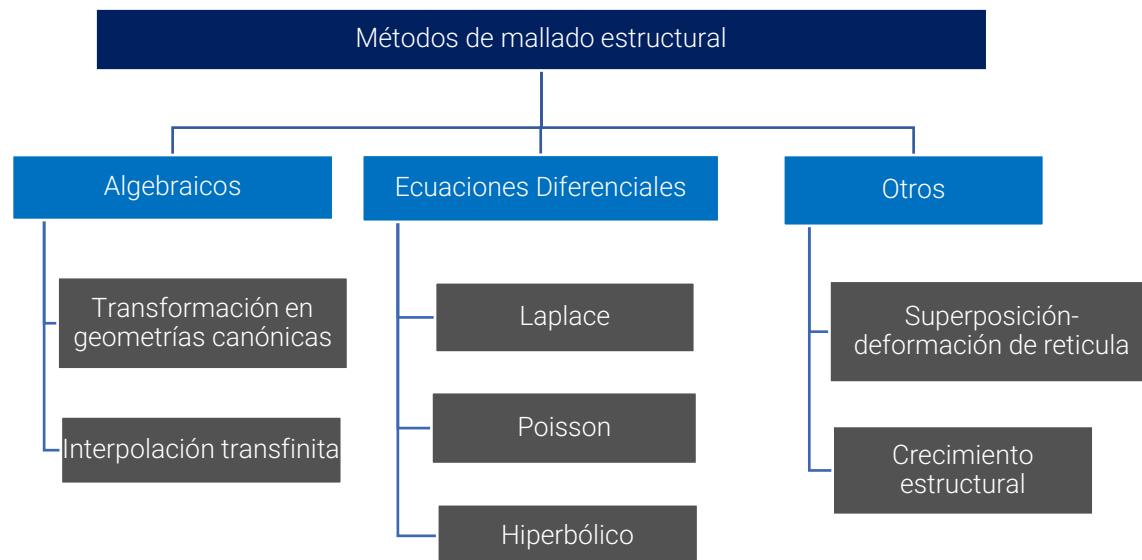


Figura 3. Mapa conceptual de los métodos de mallado estructural (Ruiz & López).

Cabe mencionar que tanto los métodos algebraicos, como los basados en ecuaciones diferenciales tienen la premisa de cambiar el sistema de coordenadas, de tal forma que sea más fácil generar los puntos que conformarán el cuerpo de la malla. Además, es posible combinar los métodos antes mencionados, por ejemplo, interpolación transfinita con uno de ecuaciones diferenciales. En este sentido, el primero funge como una aproximación inicial y el segundo para suavizar la malla.

Interpolación Transfinita

Consiste en aplicar una serie de ecuaciones algebraicas que generen los puntos internos de la malla en base a los puntos de sus fronteras. Para que esto sea posible, es necesario, transformar el dominio físico (x, y) a uno computacional (ξ, η) .

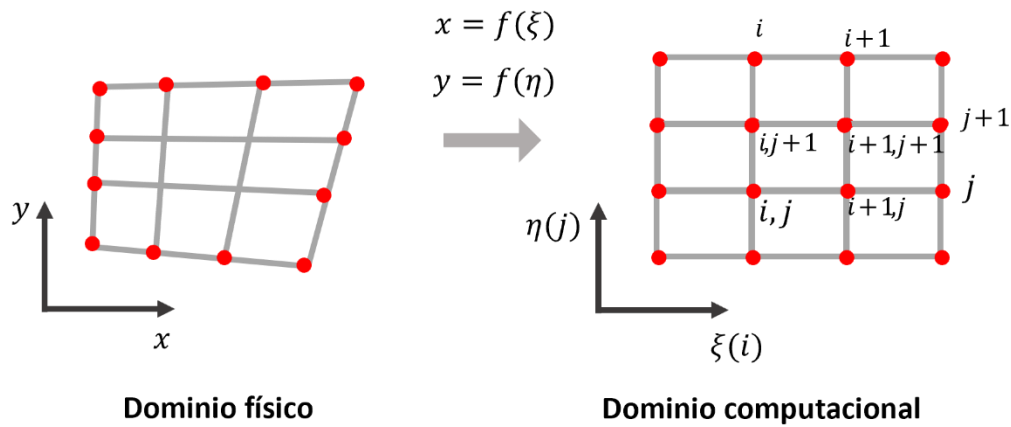


Figura 4. Transformación del dominio físico a computacional. Modificado de (google.com).

Al cambiar de coordenadas cartesianas (x, y) a curvilíneas (ξ, η) , se obtienen las ventajas de una malla rectangular. Esto debido a que cualquier punto en el plano cartesiano tiene un equivalente con los ejes curvilíneos (ξ, η) . Sin embargo, se debe ser específico en la distribución de puntos en las cuatro fronteras del dominio físico, ya que cualquier cambio puede influir en la malla resultante.

Para comprender de mejor forma el rol que toman las fronteras en el mallado, considere un dominio bidimensional representado por cuatro curvas, dos para $\xi = \text{constante}$ y dos para $\eta = \text{constante}$.

Las curvas se definen de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \text{Curva } C1: R(0, \eta) & \quad \text{Curva } C3: R(1, \eta) \\
 \text{Curva } C2: R(\xi, 0) & \quad \text{Curva } C4: R(\xi, 1)
 \end{aligned} \tag{1}$$

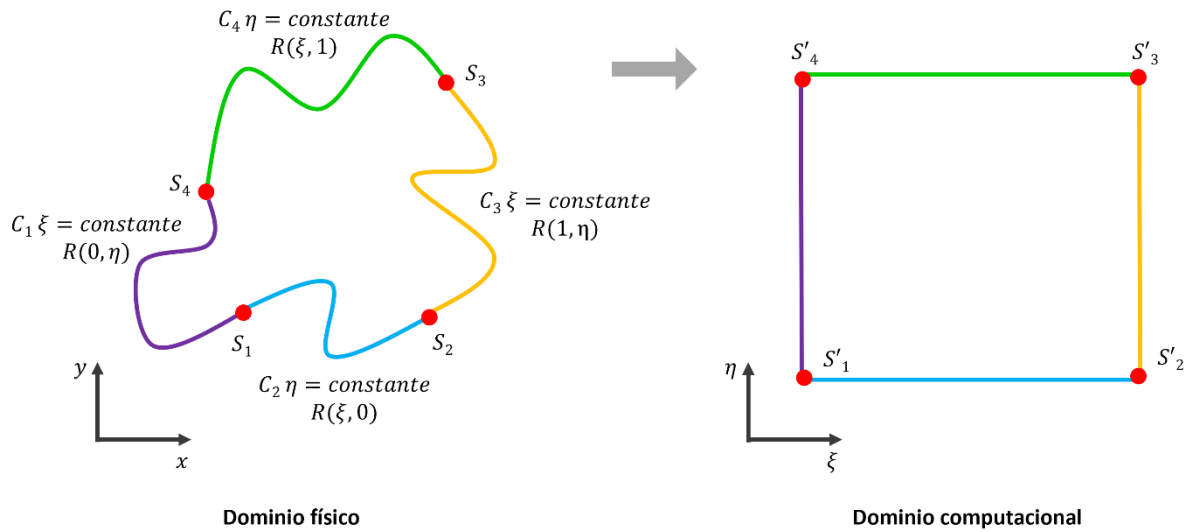


Figura 5. Contornos de malla en dominios físico y computacional. Modificado de (Selmin, 2022).

De la figura 5, se identifica que las cuatro curvas intersecan los puntos del dominio:

$$\begin{aligned} S_1 &= R(0, \eta) \cap R(\xi, 0) & S_2 &= R(\xi, 0) \cap R(1, \eta) \\ S_3 &= R(1, \eta) \cap R(\xi, 1) & S_4 &= R(\xi, 1) \cap R(0, \eta) \end{aligned} \quad (2)$$

En términos generales, cada vez que se desee implementar un método estructural de mallado, se debe de realizar al menos cuatro cortes al dominio físico y a cada uno de ellos asignarles una frontera. Para el ejemplo de la figura 5, se puede asumir que el contorno de la malla inicia en el punto S1 y avanza en sentido antihorario. Lo que da origen a las siguientes relaciones:

Frontera	Puntos	Curva
Sur	S1 – S2	C2
Este	S2 – S3	C3
Norte	S3 – S4	C4
Oeste	S4 – S1	C1

Una vez identificadas las fronteras del dominio, en este caso curvas, se procede a delimitar los puntos en las fronteras, de modo que los nodos en x sean igual a los puntos en las fronteras Sur y Norte; mientras que los nodos en y, a las fronteras Este y Oeste. Para lo anterior se pueden implementar métodos de

interpolación cúbicos o lineales si se tratase de polilíneas. Finalmente, se aplican las ecuaciones de interpolación transfinita.

Para encontrar las ecuaciones que realizan la tarea de la interpolación transfinita, considere que un esquema de interpolación unidimensional puede expresarse para un dominio bidimensional de la siguiente manera:

$$R_a(\xi, \eta) = (1 - \xi)R(0, \eta) + \xi R(1, \eta), \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (3)$$

Donde la ecuación (7) representa la interpolación, $\xi = \text{constante}$, similar para $\eta = \text{constante}$, la cual se expresa como:

$$R_b(\xi, \eta) = (1 - \eta)R(\xi, 0) + \eta R(\xi, 1), \quad 0 \leq \eta \leq 1 \quad (4)$$

Haciendo uso del operador booleano para sumar la ecuación (7) y (8), queda:

$$R_a(\xi, \eta) \oplus R_b(\xi, \eta) = R_a + R_b - R_a * R_b \quad (5)$$

Aplicando álgebra a (9) y asignando los subíndices l, r, b, t , a las fronteras left, right, bottom, top. La ecuación se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} R(\xi, \eta) = & (1 - \xi)R_l(\eta) + \xi R_r(\eta) + (1 - \eta)R_b(\xi) + (\eta)R_t(\xi) \\ & - (1 - \xi)(1 - \eta)R_b(0) - (1 - \xi)\eta R_t(0) - (1 - \eta)\xi R_b(1) \\ & - (\xi\eta)R_t(1) \end{aligned} \quad (6)$$

Lo que es equivalente a:

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) = & (1 - \xi)x_l(\eta) + \xi x_r(\eta) + (1 - \eta)x_b(\xi) + (\eta)x_t(\xi) \\ & - (1 - \xi)(1 - \eta)x_b(0) - (1 - \xi)\eta x_t(0) - (1 - \eta)\xi x_b(1) \\ & - (\xi\eta)x_t(1) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} y(\xi, \eta) = & (1 - \xi)y_l(\eta) + \xi y_r(\eta) + (1 - \eta)y_b(\xi) + (\eta)y_t(\xi) \\ & - (1 - \xi)(1 - \eta)y_b(0) - (1 - \xi)\eta y_t(0) - (1 - \eta)\xi y_b(1) \\ & - (\xi\eta)y_t(1) \end{aligned} \quad (8)$$

1.1.1 Generación de mallas por medio de ecuaciones diferenciales

Para generar una malla estructurada 2D se resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs), con el fin de localizar los puntos al interior del dominio físico. Estos sistemas pueden ser: **elípticos, parabólicos e hiperbólicos**.

Cabe aclarar que el desarrollo matemático que viene a continuación fue adaptado de la tesis de maestría: Generación de Mallas Numéricas para Geometrías Irregulares y Complejas (Teja, L., 2011).

Nótese la siguiente expresión:

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0 \quad (9)$$

Donde a, b, c, d, e, f y g pueden ser funciones de las variables independientes x e y , además de la variable independiente ϕ . Esta ecuación se clasifica de acuerdo con los coeficientes:

$$\text{Elíptica: } b^2 - 4ac < 0$$

$$\text{Parabólica: } b^2 - 4ac = 0$$

$$\text{Hiperbólica: } b^2 - 4ac > 0$$

Para construir el sistema de EDPs con dos familias de líneas ortogonales se parte de la analogía de transferencia de calor en sólidos. Donde la primera y segunda familia de isolíneas de temperatura satisfacen las ecuaciones Laplacianas siguientes:

$$\nabla^2 \xi = 0 \quad (10)$$

$$\nabla^2 \eta = 0 \quad (11)$$

Tomando la equivalencia entre el plano físico y computacional se tienen:

$$x = x(\xi, \eta), \quad y = y(\xi, \eta), \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1, \quad 0 \leq \eta \leq 1$$

Aplicando la regla de la cadena:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \quad (13)$$

Adaptando (16) y (17) con el operador Laplaciano, se puede escribir la siguiente expresión:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left(\left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 \right) + 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \left(\left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \right). \quad (14)$$

La ecuación (18) se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} = -|J|^2 \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} P + \frac{\partial x}{\partial \eta} Q \right) \quad (15)$$

$$\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = -|J|^2 \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} P + \frac{\partial y}{\partial \eta} Q \right) \quad (16)$$

Donde P y Q son funciones para controlar el espaciamiento de los nodos de la malla y J es el Jacobiano.

Por otro lado, α, β, γ se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\alpha \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} \\ \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} \end{bmatrix} + 2\beta \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} \\ \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} \end{bmatrix} + \gamma \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \\ \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \end{bmatrix} = 0 \quad (17)$$

Partiendo de las siguientes aproximaciones:

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} \approx \frac{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}}{2\Delta\xi}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \eta} \approx \frac{y_{i+1,j} - y_{i,j-1}}{2\Delta\eta}$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} \approx \frac{x_{i+1,j} - 2x_{i,j} + x_{i-1,j}}{\Delta\xi^2}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \approx \frac{y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}}{\Delta\eta^2}$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} \approx \frac{x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j-1} - x_{i-1,j+1} + x_{i-1,j-1}}{4\Delta\xi\Delta\eta}$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} \approx \frac{y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j-1} - y_{i-1,j+1} + y_{i-1,j-1}}{4\Delta\xi\Delta\eta}$$

De las ecuaciones (19) y (20), se puede expresar lo siguiente:

$$\begin{aligned} & \alpha' [x_{i+1,j} - 2x_{i,j} + x_{i-1,j}] + \gamma' [x_{i,j+1} - 2x_{i,j} + x_{i,j-1}] - 2\beta' [x_{i+1,j+1} - x_{i-1,j+1} - x_{i+1,j-1} + x_{i-1,j-1}] \\ & \alpha' [y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}] + \gamma' [y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}] - 2\beta' [y_{i+1,j+1} - y_{i-1,j+1} - y_{i+1,j-1} + y_{i-1,j-1}] \end{aligned} \quad (18)$$

Se asume que $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$. Por lo que α', β', γ' de (22) se pueden reescribir de la siguiente manera:

$$\alpha' = \frac{(x_{i,j+1} - x_{i,j-1})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j-1})^2}{(2)^2} \quad (19)$$

$$\gamma' = \frac{(x_{i+1,j} - x_{i-1,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i-1,j})^2}{(2)^2} \quad (20)$$

$$\beta' = \frac{(x_{i,j+1} - x_{i-1,j}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j-1})}{(4)^2} + \frac{(y_{i+1,j} - y_{i-1,j}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j-1})}{(4)^2} \quad (21)$$

Para resolver las ecuaciones (19) y (20), considere una variable genérica ϕ que representa a x, y . Por lo cual, se obtienen la siguiente expresión:

$$\alpha\phi_{\xi\xi} + \gamma\phi_{\eta\eta} - 2\beta + \frac{1}{J^2}(P\phi_{\xi} + Q\phi_{\eta}) = 0 \quad (22)$$

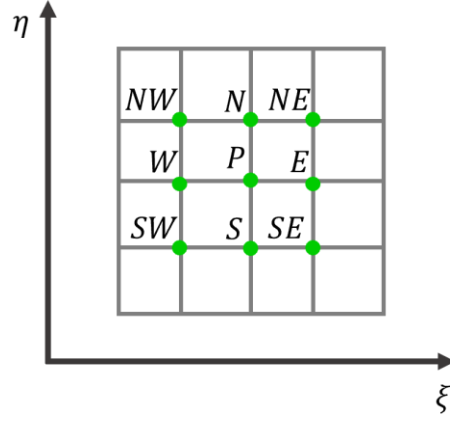


Figura 6. Plano físico transformado. Modificado de (Teja, L., 2011)

Aplicando diferencias finitas a la ecuación (22) y considerando la distribución de los puntos de la figura 6, se obtienen las siguientes expresiones:

$$\phi_{\xi\xi} = \frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{\Delta\xi^2} \quad (23)$$

$$\phi_{\xi\xi} = \frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{\Delta\xi^2} \quad (24)$$

$$\phi_{\eta\eta} = \frac{\phi_N + \phi_S - 2\phi_P}{\Delta\eta^2} \quad (25)$$

$$\phi_{\xi\eta} = \frac{\phi_{NE} + \phi_{SW} - 2\phi_{SE} - \phi_{NW}}{4\Delta\xi\Delta\eta} \quad (26)$$

$$\phi_{\xi} = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta\xi} \quad (27)$$

$$\phi_{\eta} = \frac{\phi_N - \phi_S}{2\Delta\eta} \quad (28)$$

Sustituyendo las ecuaciones (23), (24), (25), (26), (27) y (28) en (22), se obtiene,

$$\alpha \left(\frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{\Delta\xi^2} \right) + \gamma \left(\frac{\phi_N + \phi_S - 2\phi_P}{\Delta\eta^2} \right) - 2\beta \left(\frac{\phi_{NE} + \phi_{SW} - 2\phi_{SE} - \phi_{NW}}{4\Delta\xi\Delta\eta} \right) + \frac{P}{J^2} \left(\frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta\xi} \right) + \frac{Q}{J^2} \left(\frac{\phi_N - \phi_S}{2\Delta\eta} \right) = 0 \quad (29)$$

Agrupando los términos de la ecuación (29), se obtiene,

$$\begin{aligned} \phi_P \left(\frac{2\alpha}{\Delta\xi^2} + \frac{2\gamma}{\Delta\eta^2} \right) &= \phi_E \left(\frac{\alpha}{\Delta\xi^2} + \frac{P}{2J^2\Delta\xi} \right) + \phi_W \left(\frac{\alpha}{\Delta\xi^2} - \frac{P}{2J^2\Delta\xi} \right) + \phi_N \left(\frac{\gamma}{\Delta\eta^2} + \frac{Q}{2J^2\Delta\eta} \right) \\ &+ \phi_S \left(\frac{\gamma}{\Delta\eta^2} - \frac{Q}{2J^2\Delta\eta} \right) - \phi_{NE} \frac{\beta}{2\Delta\xi\Delta\eta} + \phi_{SE} \frac{\beta}{2\Delta\xi\Delta\eta} \\ &+ \phi_{NW} \frac{\beta}{2\Delta\xi\Delta\eta} - \phi_{SW} \frac{\beta}{2\Delta\xi\Delta\eta} \end{aligned} \quad (30)$$

Por simplicidad, la ecuación (30) se puede expresar de la siguiente manera:

$$A_P\phi_P = A_E\phi_E + A_W\phi_W + A_N\phi_N + A_S\phi_S + A_{NE}\phi_{NE} + A_{SE}\phi_{SE} + A_{NW}\phi_{NW} + A_{SW}\phi_{SW} \quad (31)$$

Si $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$, los coeficientes de la ecuación (31) se pueden obtener de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} A_E &= 2(\alpha + \gamma), & A_E &= \alpha + \frac{P}{2J^2}, & A_W &= \alpha - \frac{P}{2J^2}, & A_N &= \gamma + \frac{Q}{2J^2} \\ A_S &= \gamma - \frac{Q}{2J^2}, & A_{NE} &= -\frac{\beta}{2}, & A_{SE} &= \frac{\beta}{2}, & A_{NW} &= \frac{\beta}{2} \quad \text{y} \quad A_{SW} = -\frac{\beta}{2} \end{aligned} \quad (32)$$

Para fines de este material didáctico se asume $P = Q = 0$, lo que significa que no existe atracción de líneas en las fronteras de la malla. Por ende, las expresiones anteriores se simplifican a:

$$\begin{aligned} A_P &= 2(\alpha + \gamma), & A_E &= \alpha, & A_W &= \alpha, & A_N &= \gamma, & A_S &= \gamma \\ A_{NE} &= -\frac{\beta}{2}, & A_{SE} &= \frac{\beta}{2}, & A_{NW} &= \frac{\beta}{2} \quad \text{y} \quad A_{SW} = -\frac{\beta}{2} \end{aligned} \quad (33)$$

Para aplicar las ecuaciones en la generación de mallas numéricas en dos dimensiones, primero se genera una malla inicial con Interpolación Transfinita, posteriormente, se calculan los parámetros α, β, γ , se resuelven los coeficientes $A_P, A_E, A_W, \dots, A_{SW}$, se ensambla una matriz y finalmente se aplica un solver para obtener la malla refinada. Todo este procedimiento se ejecuta internamente en la aplicación MallaPy_2D V.1.0.

Agradecimientos

Este trabajo fue realizado gracias al programa UNAM-PAPIME PE101922 y al proyecto PAPIIT IA106820, participando en el desarrollo del modelo numérico y facilitando los recursos computacionales para llevarlo a cabo.

Referencias

- Chen, Z., Hua, G., & Ma, Y. (2006). *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Dallas, Texas: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Colchado, A. (20 de Enero de 2022). *Capítulo 5 - DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL*. Obtenido de Google_Sites: <https://sites.google.com/site/manifo1dmx/capitulo-5>
- Hernández, M. A., & Dominguez, G. C. (1984). *Apuntes de simulación matemática de yacimientos*. Ciudad de México: Facultad de Ingeniería UNAM.
- Ruiz, A., & López, A. (s.f.). *CONACYT*. Obtenido de CONACYT: https://www.conacyt.gov.py/sites/default/files/PVCT16-135_Transferencia.pdf
- Selmin, V. (19 de Enero de 2022). *SlideToDoc*. Obtenido de <https://slidetodoc.com/mesh-generation-concept-structured-grids-v-selmin-multidisciplinary/>
- Teja, L. (2011). *Generación de Mallas Numéricas para Geometrías Irregulares y Complejas*. México: Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico.
- Teja, L. (2018). *Modelado Numérico de Procesos Térmicos de Recuperación Mejorada de Hidrocarburos*. Ciudad De México: Instituto de Geofísica.
- Thomson, J. F., Soni, B., & Weatherill, N. (1999). *Handbook of grid generation*. CRC Press.