

OctMesh: un entorno de elementos finitos en *Octave*

J. RAFAEL RODRÍGUEZ GALVÁN
Dpto. de Matemáticas, Univ. de Cádiz
rafael.rodriguez@uca.es

Resumen

En este trabajo se presenta a *OctMesh* [1], un entorno de herramientas o *toolbox* para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales mediante el método de los elementos finitos sobre *Octave*. *Octave* [2] es un entorno de cálculo numérico con licencia libre que utiliza de forma nativa el lenguaje de *Matlab* y es altamente compatible con éste.

Técnicamente, *OctMesh*, constituye una interfaz para el acceso desde *Octave* a las posibilidades de *LibMesh* [3, 4], una biblioteca C++ para la simulación numérica de ecuaciones en derivadas parciales mediante el método de elementos finitos (también con licencia libre) desarrollada, en su mayor parte, en el CFDLab de la Universidad de Texas (aunque también ha contado con la contribución de otras personas y entidades).

LibMesh facilita el desarrollo de simulaciones numéricas utilizando elementos 1D, 2D ó 3D en arquitecturas paralelas (aunque puede funcionar en entornos secuenciales), además de incluir métodos para refinado adaptativo de mallas. Para todo ello utiliza varios paquetes de software de calidad contrastada, como la biblioteca paralela PETSc [5] o el paquete LAMMPS [6] para la resolución de sistemas lineales en máquinas secuenciales mediante métodos de Krylov.

Sin embargo, la simulación numérica utilizando *LibMesh* no está al alcance de aquellos investigadores que no dominen con soltura el lenguaje de programación C++. Además, el ciclo de trabajo en lenguajes compilados (diseño, programación, ejecución, depurado de errores) resulta con frecuencia poco ágil ante problemas de la complejidad de la resolución numérica de EDP. Con frecuencia, es conveniente utilizar lenguajes interpretados como *Freefem++* o *Matlab* (dotado de un *toolkit* de elementos finitos). El uso de *Matlab* puede resultar una posibilidad muy atractiva, debido a su gran popularidad y facilidad de uso, pero tiene el problema de ser, por sí sola, poco eficiente para aplicaciones que necesiten alto rendimiento.

En consecuencia, se ha desarrollado *OctMesh* con la intención de unir la potencia de *LibMesh* con la facilidad de uso del lenguaje de *Matlab*, intentando facilitar el desarrollo desde *Octave* de experimentos numéricos paralelos 1D, 2D ó 3D,

Internamente, *OctMesh* consiste en una serie de extensiones dinámicas para *Octave* (archivos *.oct*), escritas en C++ y que actúan como conexión con *LibMesh*, introduciendo un espacio de funciones adicionales a las existentes, por defecto, en *Octave*. Estas funciones permiten definir mallas, asociarles espacios de elementos finitos y fórmulas de cuadratura, montar y resolver los sistemas de ecuaciones asociados a las formulaciones variacionales de las EDP. Todo ello de forma interactiva o en programas (archivos *.m*) que utilizan el lenguaje interpretado *Octave/Matlab*.

Al crear estas nuevas funciones en *Octave*, se ha intentado conservar, en la medida de lo posible, la sintaxis original de las clases C++ que componen *LibMesh*. Esto no ha sido sencillo, pues el lenguaje *Matlab*, y por tanto el de *Octave*, no es orientado a objetos. Sin embargo se utilizaron una serie de técnicas avanzadas que permitieron soslayar con éxito este inconveniente.

Aunque el utilizar un lenguaje interpretado implica cierta pérdida de rendimiento en *OctMesh*, a los usuarios más avanzados les resultará útil la posibilidad de programar directamente en C++ con *LibMesh* las partes críticas del algoritmo, que pueden ser luego utilizadas desde un cuerpo del programa realizado con *OctMesh*; la afinidad de sintaxis pretende hacer natural para los desarrolladores el proceso de migración entre ambas.

Con la intención de evaluar las posibilidades y el rendimiento de *OctMesh*, se han desarrollado distintos experimentos numéricos, que serán presentados como conclusión.

Sección en el CEDYA 2007: OTROS TEMAS (Cálculo Científico y Computacional)

Referencias

- [1] J. Rafael Rodríguez Galván. *OctMesh*. <http://octmesh.forja.rediris.es>
- [2] J.W. Eaton y otros. *Octave*. <http://www.octave.org>
- [3] B. Kirk, J. Peterson y otros. *LibMesh Finite Element Library*. <http://LibMesh.sourceforge.net/>
- [4] B. Kirk, J. Peterson, R.H. Stogner, G.F. Carey *LibMesh: A C++ Library for Parallel Adaptive Mesh Refinement/Coarsening*. Engineering with Computers, preprint (2006).
- [5] Argonne National Laboratory, Mathematics and Computer Science Division. *PETSC*. <http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/>
- [6] Skalicky T. *LAMMPS Reference Manual*. Dresden University of Technology.