

НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ И СТРУКТУРЫ ДАННЫХ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ В СТАНДАРТЕ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ C++23*

В. Г. Крупкин¹, Г. Н. Мохин²

Аннотация: В новую версию стандарта и библиотеки стандартных шаблонов (STL, Standard Template Library) языка программирования C++, вышедшую в конце 2023 г., включены новые алгоритмы и структуры данных. В статье описана работа с этими новыми возможностями: многомерными массивами (std::mdspan) и функциями библиотеки линейной алгебры (std::linalg). С их помощью открываются новые возможности ускорения численных схем для научных расчетов, в том числе для моделирования задач горения на персональных компьютерах и высокопроизводительных кластерах. Показано, что внедрение новых функций позволяет существенно сократить затраты на проектирование, написание и отладку кода, который может быть объектно-ориентированным и допускает повторное использование на разных архитектурах. При этом производительность вычислений остается на прежнем низком уровне процедурных подходов к программированию в стиле языка C. В качестве примера применения указанных возможностей приведены результаты расчета зажигания прямого угла поверхностью постоянной температуры.

Ключевые слова: теория горения; численное моделирование горения; оптимизация; язык программирования C++ в научных расчетах

DOI: 10.30826/CE24170112

EDN: YDLTMH

Литература

1. Pitt-Francis J., Whiteley J. 2017. Guide to scientific computing in C++. — 2nd ed. — New York, NY, USA: Springer. 287 p. doi: 10.1007/978-3-319-73132-2.
2. Крупкин В. Г., Мохин Г. Н. Ускорение численных схем для моделирования задач пульсирующего горения с использованием новых возможностей языка C++ // Горение и взрыв, 2023. Т. 16. № 2. С. 73–79.
3. ISO/IEC JTC 1/SC 22 Programming languages, their environments and system software interfaces. <https://www.iso.org/standard/83626.html>.
4. Basic Linear Algebra Subprograms Technical (BLAST) Forum Standard. 2001. <https://www.netlib.org/blas/blast-forum/blas-report.pdf>.
5. Eigen: C++ template library for linear algebra: Matrices, vectors, numerical solvers, and related algorithms. <https://eigen.tuxfamily.org>.
6. Armadillo: C++ library for linear algebra & scientific computing. <https://arma.sourceforge.net>.
7. Blaze: Open-source, high-performance C++ math library for dense and sparse arithmetic. <https://github.com/dendisuhubdy/blaze>.
8. uBlas: Boost Linear and Multilinear Algebra Library. https://www.boost.org/doc/libs/1_69_0/libs/numeric/ublas/doc/index.html.
9. A free function linear algebra interface based on the BLAS. <https://wg21.link/p1673>.
10. Крупкин В. Г., Мохин Г. Н. Зажигание заостренных тел накаливаемой поверхностью постоянной температуры // Горение и взрыв, 2012. Вып. 5. С. 194–198.

Поступила в редакцию 22.01.2024

* Данная работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований РФ «Процессы горения и взрыва», регистрационный № 122040500073-4, и имела бюджетное финансирование.

¹ Федеральное исследовательское учреждение «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук», krupkin@chph.ras.ru

² Федеральное исследовательское учреждение «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук», mokhin@chph.ras.ru