

提高基于 deal.II 库的高阶大气动力学求解器的可扩展性

Giuseppe Orlando⁽¹⁾,
Tommaso Benacchio⁽²⁾, Luca Bonaventura⁽³⁾

⁽¹⁾ CMAP, CNRS, 巴黎综合理工学院, 巴黎综合理工学院研究所
萨克雷公路, 91120 帕莱索, 法国
`giuseppe.orlando@polytechnique.edu`

⁽²⁾ 天气研究, 丹麦气象研究所
圣凯尔斯广场 11 号, 2100 哥本哈根, 丹麦
`tbo@dmi.dk`

⁽³⁾ 数学系, 米兰理工大学
勒昂纳多·达·芬奇广场 32 号, 20133 米兰, 意大利
`luca.bonaventura@polimi.it`

关键词数值天气预报, 非一致网格, 地形上的流, 隐式显式方案, deal.II

Abstract

我们展示了基于 `deal.II` 库的大气动力学应用数值方案在大规模并行性能方面的最新进展。隐式-显式不连续有限元方案基于无矩阵方法，这意味着不会构建全局稀疏矩阵，实际实现的只是线性算子对一个向量的作用。经过分析评估后，我们专注于数值方法的性能优化，并描述了不同预处理和求解技术在该框架中的影响。此外，我们展示了使用 `deal.II` 库的最新版本和合适的执行标志如何能够提高并行性能。

1 介绍

高效的大气流动数值模拟是可行的天气和气候预测以及若干相关实际应用的关键。中期全球数值天气预报（NWP）通常需要在气象中心的预报周期内一个小时内完成，以满足提前十天的预测需求。此外，用于这些预测的计算网格正被细化到接近千米尺度，而实验性的有限区域模型已经达到了百米尺度 [10]。因此，在当前由空间分辨率不断提高所驱动的计算资源需求不断增加的情况下，大规模并行模型的可扩展性是一个基本要求。

在这项工作中，我们介绍了用于大气动力学应用的隐式显式间断伽尔金（IMEX-DG）求解器 [12] 的并行性能的最新进展 [13, 15, 14]，这是在作者先前分析的基础上进行的 [16]。实现是在 `deal.II` 库 [1, 2, 3] 框架内进行的。首先，我们展示了如何通过使用合适的预处理技术可以显著提高椭圆压力求解器的性能。接下来，我们评估了激活执行标志和使用最新版本库（9.6.2,[1]）的影响。最后，我们介绍了采用不同策略解决线性系统的结果。

论文结构如下。在 2 节中，我们简要回顾了模型方程以及本文中使用的数值方法的相关细节。三维大气流动基准中的数值实验的性能分析和并行性能分析呈现在 3 节中。最后，一些结论报告在 4 节中。

2 模型方程和数值方法的一些细节

可压缩欧拉方程在气体动力学中代表了大气流动最全面的数学模型 [20]。为简化起见，考虑干燥且非旋转的情况，其数学模型如下所示：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \rho \mathbf{g} \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho h + \rho k) \mathbf{u}] &= \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $t \in (0, T_f]$ 是时间坐标，并附有计算域上的适当初始和边界条件。这里 $\otimes$ 表示张量积， T_f 是最终时间， ρ 是密度， $\mathbf{u}$ 是流体速度， p 是压力。此外， $\mathbf{g} = -g\mathbf{k}$ 是重力加速度， $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$ 和 $\mathbf{k}$ 分别是标准笛卡尔坐标系中向上指向的单位向量。最后， E 表示每单位质量的总能量， h 是比焓，而 $k = 1/2 |\mathbf{u}|^2$ 是比动能。系统 (1) 由理想气体的状态方程补充，该方程由 $\rho e = \frac{1}{\gamma-1} p$ 给出，其中 e 表示比内能 $e = E - k$ ，等熵指数 γ 取值等于 1.4。

时间离散化基于隐式显式（IMEX）龙格-库塔（RK）方法 [6]，这是一种广泛用于包含刚性和非刚性成分的常微分方程系统的方法。IMEX-RK 方案由伴随的布奇表格紧凑地表示：

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array} \quad \begin{array}{c|c} \tilde{\mathbf{c}} & \tilde{\mathbf{A}} \\ \hline & \tilde{\mathbf{b}}^\top \end{array}$$

其中 $\mathbf{A} = \{a_{lm}\}$, $\mathbf{b} = \{b_l\}$, $\mathbf{c} = \{c_l\}$, $l, m = 1 \dots s$ 表示显式方法的系数， $\tilde{\mathbf{A}} = \{\tilde{a}_{lm}\}$, $\tilde{\mathbf{b}} = \{\tilde{b}_l\}$ 以及 $\tilde{\mathbf{c}} = \{\tilde{c}_l\}$, $l, m = 1 \dots s$ 表示隐式方法的系数，而 s 表示该方法的阶段数。我们参考例如 [6, 19] 中的详细分析来讨论这两个伴随方案的阶数和耦合条件。一个通用的 IMEX-RK l 阶方法，时

间步长为 Δt ，用于 Euler 方程如下所示：

$$\begin{aligned}\rho^{(l)} &= \rho^n - \sum_{m=1}^{l-1} a_{lm} \Delta t \nabla \cdot \left(\rho^{(m)} \mathbf{u}^{(m)} \right) \\ \rho^{(l)} \mathbf{u}^{(l)} + \tilde{a}_{ll} \Delta t \nabla p^{(l)} &= \mathbf{m}^{(l)} \\ \rho^{(l)} E^{(l)} + \tilde{a}_{ll} \Delta t \nabla \cdot \left(h^{(l)} \rho^{(l)} \mathbf{u}^{(l)} \right) &= \hat{e}^{(l)},\end{aligned}\tag{2}$$

其中我们设定了

$$\mathbf{m}^{(l)} = \rho^n \mathbf{u}^n - \sum_{m=1}^{l-1} a_{lm} \Delta t \nabla \cdot \left(\rho^{(m)} \mathbf{u}^{(m)} \otimes \mathbf{u}^{(m)} \right) - \sum_{m=1}^{l-1} \tilde{a}_{lm} \Delta t \nabla p^{(m)}\tag{3}$$

$$\hat{e}^{(l)} = \rho^n E^n - \sum_{m=1}^{l-1} \tilde{a}_{lm} \Delta t \nabla \cdot \left(h^{(m)} \rho^{(m)} \mathbf{u}^{(m)} \right) - \sum_{m=1}^{l-1} a_{lm} \Delta t \nabla \cdot \left(k^{(m)} \rho^{(m)} \mathbf{u}^{(m)} \right)\tag{4}$$

请注意，形式上将 $\rho^{(l)} \mathbf{u}^{(l)}$ 代入能量方程，并考虑到定义 $\rho E = \rho e + \rho k$ 和 $h = e + p/\rho$ ，可以得到以下非线性 Helmholtz 型压力方程：

$$\begin{aligned}\rho^{(l)} \left[e(p^{(l)}, \rho^{(l)}) + k^{(l)} \right] &- \tilde{a}_{ll}^2 \Delta t^2 \nabla \cdot \left[\left(e(p^{(l)}, \rho^{(l)}) + \frac{p^{(l)}}{\rho^{(l)}} \right) \nabla p^{(l)} \right] \\ &+ \tilde{a}_{ll} \Delta t \nabla \cdot \left[\left(e(p^{(l)}, \rho^{(l)}) + \frac{p^{(l)}}{\rho^{(l)}} \right) \mathbf{m}^{(l)} \right] = \hat{e}^{(l)},\end{aligned}\tag{5}$$

该方程通过固定点过程求解。我们参考 [12, 17, 18] 获取该方法的理论属性的进一步参考资料和详细信息。

空间离散化基于一种不连续伽辽金 (DG) 方法 [5]，该方法结合了高阶精度和高度数据局部框架中的灵活性。特别是，这种方法特别适合于网格自适应方法 [13, 15]。形状函数对应于每个坐标方向上 $(r+1)$ 阶 Gauss-Lobatto 求积规则的支持点的拉格朗日插值多项式的乘积，其中 r 表示多项式次数。方法 (2) 的离散公式可以表示为

$$\mathbf{A}^{(l)} \mathbf{U}^{(l)} + \mathbf{B}^{(l)} \mathbf{P}^{(l)} = \mathbf{F}^{(l)}\tag{6}$$

$$\mathbf{C}^{(l)} \mathbf{U}^{(l)} + \mathbf{D}^{(l)} \mathbf{P}^{(l)} = \mathbf{G}^{(l)},\tag{7}$$

其中 $\mathbf{U}^{(l)}$ 代表速度场的自由度向量，而 $\mathbf{P}^{(l)}$ 是压力场的自由度向量。关于所有矩阵和向量的具体表达式，请参见 [13, 17, 16]。我们仅报告矩阵 $\mathbf{A}^{(l)}$ 的表达式，该表达式将在第 3 节的讨论中用到：

$$A_{ij}^{(l)} = \sum_{K \in \mathcal{T}_H} \int_K \rho^{(l)} \varphi_j \cdot \varphi_i d\mathbf{x},\tag{8}$$

其中 $\mathcal{T}_H$ 表示计算网格， φ_i 表示用于离散化速度的空间多项式函数集的基础函数，而 $d\mathbf{x}$ 是积分的空间元素。形式上，从 (6) 可以推导出

$$\mathbf{U}^{(l)} = \left(\mathbf{A}^{(l)} \right)^{-1} \left(\mathbf{F}^{(l)} - \mathbf{B}^{(l)} \mathbf{P}^{(l)} \right),\tag{9}$$

并获得

$$\mathbf{D}^{(l)} \mathbf{P}^{(l)} + \mathbf{C}^{(l)} \left(\mathbf{A}^{(l)} \right)^{-1} \left(\mathbf{F}^{(l)} - \mathbf{B}^{(l)} \mathbf{P}^{(l)} \right) = \mathbf{G}^{(l)}.\tag{10}$$

上述系统然后按照 [12] 中描述的固定点程序求解。在 3.1 节和 3.3 节中，我们描述了使用不同的预处理和求解技术对系统 (10) 的影响。

3 数值结果

在本节中，我们展示了使用上一节所述的数值方法模拟理想化三维地形大气流测试案例 [11, 15] 的结果，并重点关注其可扩展性。这些模拟使用了高达 1024 个 2x AMD EPYC Rome 7H12 64c 2.6GHz CPU 在 MeluXina HPC 设施¹上运行，并采用了 OpenMPI 4.1.5。编译器是 GCC 版本 12.3，向量化级别为 256 位。

我们考虑一个流经钟形山的三维配置，已经在 [11, 13, 15] 中进行了研究。计算域是 $(0, 60) \times (0, 40) \times (0, 16)$ km。山体轮廓定义如下：

$$h(x, y) = h_c \left[1 + \left(\frac{x - x_c}{a_c} \right)^2 + \left(\frac{y - y_c}{a_c} \right)^2 \right]^{-\frac{3}{2}}, \quad (11)$$

其中 $h_c = 400$ m, $a_c = 1$ km, $x_c = 30$ km, 和 $y_c = 20$ km。浮力频率为 $N = 0.01 \text{ s}^{-1}$ ，而背景速度为 $\bar{u} = 10 \text{ m s}^{-1}$ 。最终时间是 $T_f = 1$ h。初始条件如下 [4]：

$$p = p_{ref} \left\{ 1 - \frac{g}{N^2} \Gamma \frac{\rho_{ref}}{p_{ref}} \left[1 - \exp \left(-\frac{N^2 z}{g} \right) \right] \right\}^{1/\Gamma}, \quad \rho = \rho_{ref} \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^{1/\gamma} \exp \left(-\frac{N^2 z}{g} \right), \quad (12)$$

其中 $p_{ref} = 10^5$ Pa 和 $\rho_{ref} = \frac{p_{ref}}{RT_{ref}}$ ，且 $T_{ref} = 293.15$ K。最后，我们设定 $\Gamma = \frac{\gamma-1}{\gamma}$ 。我们引用 [15] 来实现边界条件。除非另有说明，我们考虑 a) 一个由 $N_{el} = 120 \times 80 \times 32 = 307200$ 个元素组成的均匀网格，多项式次数为 $r = 4$ ，导致每个标量变量大约有 38.5 百万个未知数和 125 m 的分辨率；以及 b) 一个由 $N_{el} = 204816$ 个元素组成的非一致网格，产生每个标量变量大约 25.6 百万个未知数和最大分辨率为 62.5 m。非一致网格的特点是相邻单元在水平和垂直方向上具有不同的分辨率 [15, 16]，其使用提供了显著的计算节省 [15, 16]。以下优化标志在整个运行中被采用：

```
-O2 -funroll-loops -funroll-all-loops -fstrict-aliasing -Wno-unused-local-tydefs
```

这些是发布模式下 deal.II 的标准设置（参见 https://www.dealii.org/developer/users/cmake_user.html）。不幸的是，由于计算资源的限制，本节中报告的比例分析只能对每种不同的配置执行一次。

3.1 预处理技术的影响

预条件共轭梯度法结合了几何多重网格预条件器用于求解对称正定线性系统，而对于非对称线性系统的求解，则采用了带有 Jacobi 预条件器的 GMRES 求解器。采取了 [2] 无矩阵的方法，意味着没有构建全局稀疏矩阵，仅实现了线性算子在向量上的作用。这种方法对于高阶离散化方法 [7] 非常有效。然而，这给预条件带来了某些困难，因为矩阵不可用且无法采用诸如 ILU 等标准技术。对于对称正定系统，与无矩阵方法兼容的有效预条件技术基于所谓的 Chebyshev 多项式，该多项式依赖于矩阵特征值的估计以抑制特征值范围 [9]。

基于特征值估计的方法不能直接用于求解 (10)，因为它需要预条件矩阵 [21] 的对称性和正定性。此外，由于无矩阵方法的原因，无法轻易获得矩阵 $(\mathbf{A}^{(l)})^{-1}$ 、 $\mathbf{D}^{(l)}$ 和 $\mathbf{C}^{(l)}$ 的元素。在一个无矩阵框架中，可以通过将算子应用于所有单位向量来得到该算子的矩阵表示。显然，这是

¹<https://docs.lxp.lu/>

一个非常低效的过程，因为它需要对一个 $n \times n$ 矩阵执行 n 次算子评估。实际上，积分是如此高效以至于计算在没有显著额外开销的情况下完成²。然而，使用此过程来计算 $(\mathbf{A}^{(l)})^{-1}$ ， $\mathbf{D}^{(l)}$ 和 $\mathbf{C}^{(l)}$ 却非常低效，因为它需要评估三个算子以及在每次算子评估时求解一个线性系统以计算 $(\mathbf{A}^{(l)})^{-1}$ 。因此，最简单的解决方案是仅考虑由 $\mathbf{D}^{(l)}$ 提供的贡献，这考虑了内能。对于本文研究中的低马赫数流，由于速度通常较低，内能在相对于动能方面占据主导地位，这种近似可以被认为是可靠的。这是在 [15] 中采用的策略，我们称之为内部能量预处理器。

另一种可以在无矩阵框架中轻松实现的方法是定义一个算子，该算子在求解 (10) 时考虑基础的非线性 Helmholtz 型方程 (5)。更具体地说，我们考虑与压力 DG 离散化相关的弱形式的体积贡献 (5)。因此，预条件子是矩阵 $\tilde{\mathbf{S}}^{(l)}$ 对角部分的逆，其元素为

$$\tilde{S}_{ij}^{(l)} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \rho^{(n,l)} e(\Psi_j, \rho^{(l)}) \Psi_i d\mathbf{x} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \tilde{a}_{ll}^2 \Delta t^2 \left(e(p^{(l)}, \rho^{(l)}) + \frac{p^{(l)}}{\rho^{(l)}} \right) \nabla \Psi_j \cdot \nabla \Psi_i d\mathbf{x}. \quad (13)$$

其中 Ψ_i 表示用于离散化压力的多项式函数空间的基础函数。矩阵 $\tilde{\mathbf{S}}^{(l)}$ 是两个贡献的和：第一个考虑内部能量，与矩阵 $\mathbf{D}^{(l)}$ 一致；第二个考虑由于比焓的贡献，并考虑到底层椭圆性质的 (5)。在固定点过程中，(13) 中的压力 $p^{(l)}$ 是在前一次固定点迭代中评估的。我们称此策略为赫尔姆霍茨预条件器。

对使用两种预处理技术的求解时间进行分析显示，当使用均匀网格时，采用 Helmholtz 预条件器仅能带来相对较小的计算时间节省——大约为 18%（使用 128 个核心（1 个节点））——且随着核心数量增加而减少（图 1）。对于非一致网格，计算时间节省更为显著，使用 128 个核心时节省了 60%，使用 2048 个核心时则节省了 46%（图 1）。因此，策略 Helmholtz 预条件器在求解时间方面具有显著优势，特别是在非一致网格的情况下。接下来，我们将仅关注这种预处理技术以及使用非一致网格的实验。

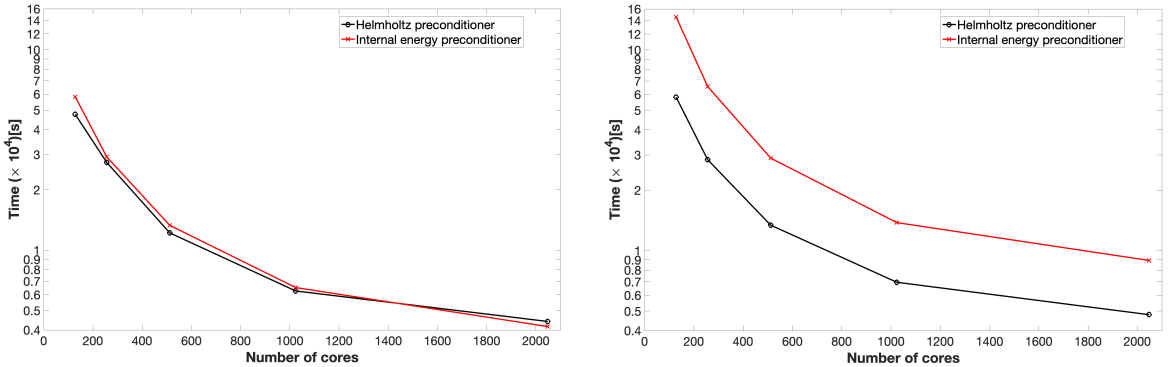


Figure 1: 预处理技术分析，在问题 (2) 的数值解中所花费的实际时间，流经 3D 小山测试案例。左侧：均匀网格。右侧：非一致网格。黑色线条显示了使用赫尔姆霍茨预条件器方法的结果，而红色线条显示了使用内部能量预条件器方法的结果。

²https://www.dealii.org/current/doxygen/deal.II/step_37.html

3.2 执行标志和版本的影响

接下来，我们分析一些执行标志的影响以及使用 `deal.II 9.6.2` 版本 [1] 代替 `deal.II 9.5.2` 版本 [2] 的影响。得益于 MeluXina 的 EPICURE 团队的支持，已经表明执行标志

```
导出 DEAL_II_NUM_THREADS="$SLURM_CPUS_PER_TASK"
```

```
导出 OMP_NUM_THREADS="$SLURM_CPUS_PER_TASK"
```

在强扩展性和墙钟时间两个方面都提高了求解器的并行性能（图 2）。然而，使用 `deal.II 9.6.2` 版本获得了更大规模的并行性能提升，与在拥有 2048 个核心（即 16 个节点）的运行中使用 9.5.2 版本相比，计算时间节省了大约 28%。因此，在以下第 3.3 节的结果中，采用了具有最优执行标志的 `deal.II 9.6.2` 版本。

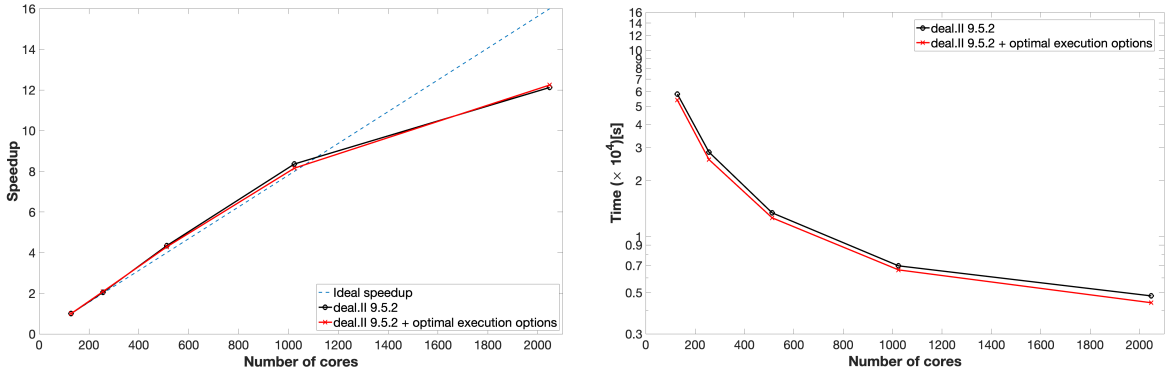


Figure 2: 使用不同执行标志对问题 (2) 数值解性能的影响，流动经过 3D 小山测试案例。左：强扩展性。右：WT 时间。结果是通过非一致网格获得的。黑线显示了标准执行标志的结果，而红线显示了最优执行标志的结果。

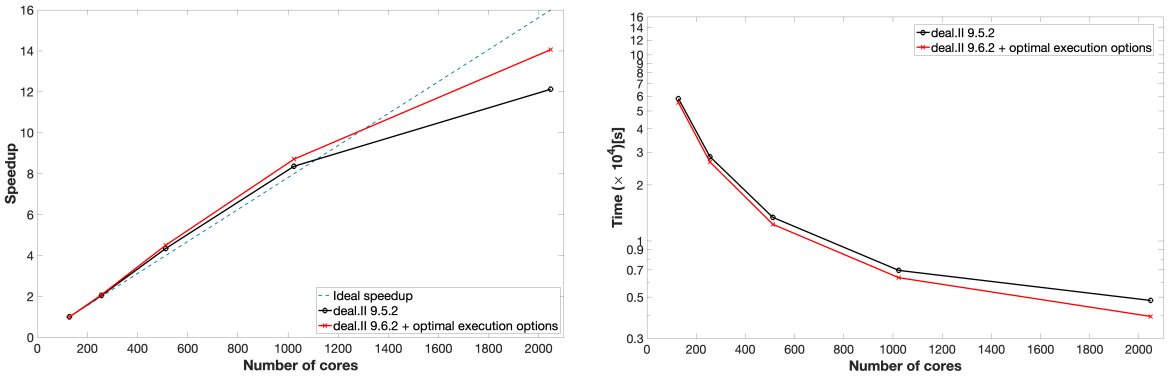


Figure 3: 使用不同 `deal.II` 版本对问题 (2) 数值解的影响，流动经过三维山丘测试案例。左：强扩展性。右：WT 时间。结果是在非一致网格下获得的。黑色线条显示了使用 `deal.II 9.6.2` 版本和最优执行标志的结果，而红色线条则显示了使用 `deal.II 9.5.2` 版本和标准执行标志的结果。

3.3 块对角算子的快速评估

最后，我们调查了算法不同部分所花费的计算时间分布。性能分析显示，正如预期的那样，绝大多数执行时间都花在求解问题 (10) 计算压力场 (图 4) 上。结果是使用非一致网格获得的，但对于均匀网格也同样适用 (未展示)。除了计算压力场所花费的计算时间外，可以立即注意到计算速度场的相对成本在增加 (图 4 中的橙色条)，其范围从 128 核心时的大约 3.6% 到 2048 核心时的大约 13%。该算法的一部分包括计算 $(\mathbf{A}^{(l)})^{-1}$ (我们参考 [12, 13] 获取所有细节)，即求解一个线性系统。然而，由于无矩阵方法，在固定点循环中这个操作会被重复多次，这解释了计算负担的增加。

矩阵 $\mathbf{A}^{(l)}$ (8) 是一个简单的块对角算子。在 DG 框架中评估和求逆块对角算子的有效技术已在 [7] 中提出。然而，它们要求沿每个坐标方向使用相同数量的积分点和自由度，因为这会在基变换后，在块对角算子 [7] 的代数结构中产生对角块。更具体地说，如 [7, 8] 所解释的那样，块对角算子被求逆为 $\mathbf{S}^{-T} \mathbf{J}^{-1} \mathbf{S}^{-1}$ 。其中 $\mathbf{J}$ 是一个对角矩阵，其元素等于雅可比行列式的值乘以数值积分权重，而 $\mathbf{S}$ 是一个方阵，行是基函数，列是数值积分点，即 $S_{ij} = \varphi_i(\mathbf{x}_j)$ 。然后将矩阵 $\mathbf{S}$ 构建为小一维矩阵的克罗内克积 (张量积)，这些小一维矩阵可以在每个阶段高效求逆。在一个节点 DG 框架中，节点位于 Gauss-Legendre-Lobatto 公式的求积点 $r + 1$ 上，正如这里所考虑的那样，这意味着可以沿每个坐标方向使用具有 $r + 1$ 个求积点的 Gauss-Legendre 公式来进行数值积分。

这种方法的主要缺点是引入了混叠误差。基于高斯-勒让德公式具有 $r + 1$ 个求积点的数值积分可以精确地积分次数不超过 $2r + 1$ 的多项式，因此在 [7] 中提出的策略不会为由两个基函数乘积组成的经典质量矩阵引入混叠误差。然而，矩阵 $\mathbf{A}^{(l)}$ (8) 是一个修改后的质量矩阵，并且是由三个多项式的乘积组成。因此，对于 $r > 1$ 会引入混叠误差。到目前为止所示结果的数值积分基于所谓的相容积分或过积分 (详见 [14] 以获取更多详情)。更具体地说，采用了一个在每个坐标方向上有 $2r + 1$ 个求积点的高斯-勒让德公式。请注意，选择多项式表示密度、速度和压力的方法避免了理想气体定律中的任何多项式除法，因此由于前述一致积分，所有积分都可以无混叠误差地计算出来。因此，数值求积公式的选取与需要对所有项进行积分以避免混叠误差有关。

首先，我们分析快速评估块对角算子在精度方面的影响。我们考虑一个由 $N_{el} = 60 \times 40 \times 16 = 38400$ 个元素组成的均匀网格，即，分辨率 250 m，最终时间 $T_f = 1$ h。两种数值策略求解线性系统的结果建立了良好的一致性 (图 5)。使用块对角算子的快速评估节省了大约 20% 的计算时间。因此，第一次测试表明，尽管存在混叠误差，但块对角算子的快速评估在精度方面提供了类似的结果。我们将在未来的工作中进一步研究这一问题。

最后，我们展示了块对角算子的快速评估对并行性能的影响。可以很容易地注意到计算速度场所花费的计算时间显著减少 (图 6 中的橙色条)。更具体地说，相对于运行时间的比例降低到大约 0.52%，使用了 2048 个核心。强扩展性 (图 7 左上角)，当使用块对角算子的快速评估 (红线) 时，显然不如使用一致积分 (黑线) 好，因为块对角算子的评估非常高效，即使对于相对较少的核心数量也只需要很少的时间 (图 7 左下角)。这一点进一步通过显著的求解时间优势得到确认 - 使用 128 个核心时为 53%，使用 2048 个核心时约为 47% - 由块对角算子的快速评估带来 (图 7 右上角)。此外，可以很容易地注意到，大部分计算时间都用于求解 (10) 以计算压力场 (图 7，右下角)。

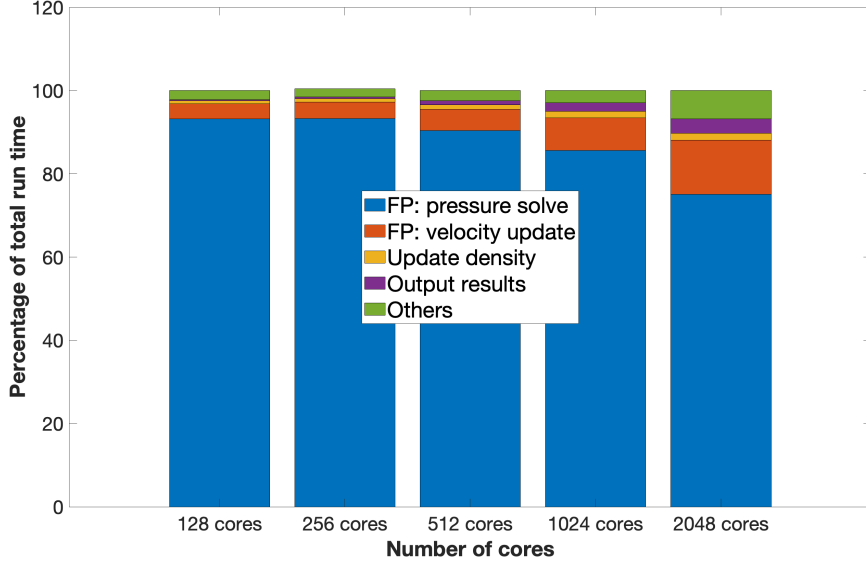


Figure 4: 算法中各种块的计算时间分布，用于解决 (2) 问题，即三维山丘流动测试案例，作为核心数量的函数。

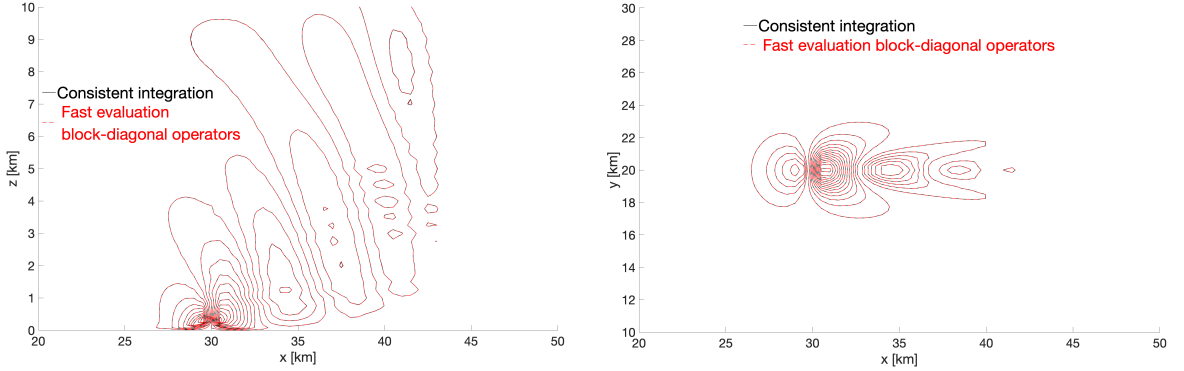


Figure 5: 三维山丘流动测试案例, 在 $T_f = 1$ h 处计算的垂直速度。左: $x-z$ 在 $y = 20$ km 处的切片。右: $x-y$ 在 $z = 20$ km 处的切片。连续黑色线条显示了使用一致积分的结果，而虚线红色线条报告了块对角算子快速评估的结果。

4 结论

本文报告了在大气动力学模拟中 IMEX-DG 模型的并行性能最近取得的进步，这些内容呈现于 [12, 13]，并遵循了 [16] 中的分析。首先，我们展示了使用合适预条件器的影响，然后是使用合适的执行标志和最新版本的 `deal.II` 的影响，最后是针对于块对角算子 [7] 的有效无矩阵技术的使用。

在未来的工作中，我们旨在进一步分析预条件子的理论性质，进一步研究直接求解块对角算子的影响，并利用此技术构建更合适的代数/几何预条件子，因为 $(\mathbf{A}^{(l)})^{-1}$ 可以很容易地计算。然而，我们指出，对于源自双曲问题的非对称线性系统的无矩阵多重网格预条件子的收敛性质，尚没有理论结果。此外，我们计划纳入更复杂的物理现象，特别是潮湿空气，并开发一个包含旋转的球面几何三维动力内核，以便能够测试更现实的大气流。

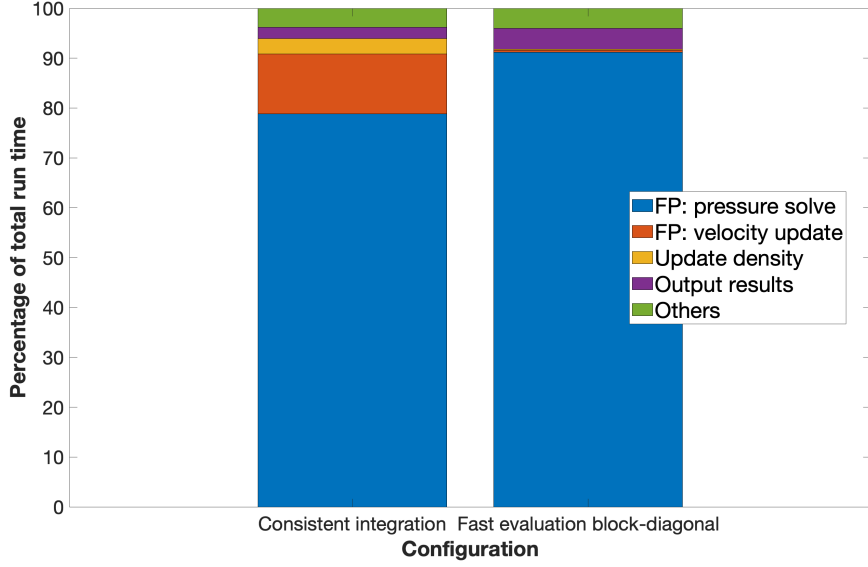


Figure 6: 算法解决 (2) 问题时，计算时间在各个块中的分布情况，该问题使用 2048 个核心进行的三维山丘流动测试案例。左：一致数值积分。右：快速评估块对角算子。

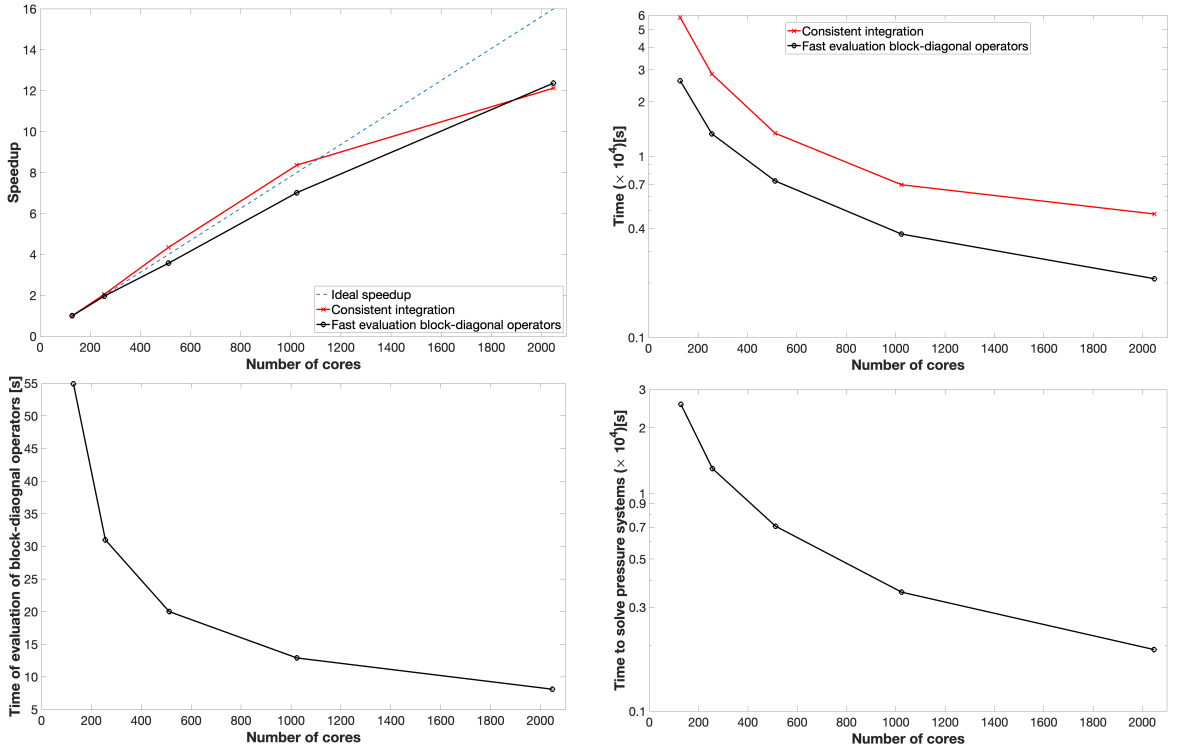


Figure 7: 求解器对问题 (2) 的并行性能，即三维丘陵流动测试案例中块对角算子快速评估的性能。左上：强扩展性。右上：墙钟时间。左下：块对角算子评估的墙钟时间。右下：用于压力场 (10) 线性系统求解的墙钟时间。在顶部面板中，黑色线条显示了快速评估块对角算子的结果，而红色线条报告了采用一致积分得到的结果。

致谢

模拟运行得益于 EuroHPC JU Benchmark And Development 项目 EHPC-DEV-2024D10-054 提供的计算资源。我们感谢 Application Support EPICURE Team 团队, 特别是 W.A. Mainassara 的支持和帮助。这项工作部分得到了 ESCAPE-2 项目的资助, 该项目是欧盟地平线 2020 研究与创新计划的一部分 (资助协议号 800897)。

References

- [1] P.C. Africa et al. “The deal.II library, Version 9.6”. *Journal of Numerical Mathematics* 32 (2024), pp. 369–380.
- [2] D. Arndt et al. “The deal.II library, Version 9.5”. *Journal of Numerical Mathematics* 31 (2023), pp. 231–246.
- [3] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. “deal.II: a general-purpose object-oriented finite element library”. *ACM Transactions on Mathematical Software* 33 (2007), pp. 24–51.
- [4] T. Benacchio, W.P. O’Neill, and R. Klein. “A blended soundproof-to-compressible numerical model for small-to mesoscale atmospheric dynamics”. *Monthly Weather Review* 142 (2014), pp. 4416–4438.
- [5] F.X. Giraldo. *An Introduction to Element-Based Galerkin Methods on Tensor-Product Bases*. Springer Nature, 2020.
- [6] C.A. Kennedy and M.H. Carpenter. “Additive Runge-Kutta schemes for convection-diffusion-reaction equations”. *Applied Numerical Mathematics* 44 (2003), pp. 139–181.
- [7] M. Kronbichler and K. Kormann. “Fast matrix-free evaluation of discontinuous Galerkin finite element operators”. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 45 (2019), pp. 1–40.
- [8] M. Kronbichler et al. “Comparison of implicit and explicit hybridizable discontinuous Galerkin methods for the acoustic wave equation”. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 106 (2016), pp. 712–739.
- [9] C. Lanczos. “An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators”. *Journal of research of the National Bureau of Standards* 45 (1950), pp. 255–282.

- [10] H.W. Lean et al. “The hectometric modelling challenge: Gaps in the current state of the art and ways forward towards the implementation of 100-m scale weather and climate models”. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 150 (2024), pp. 4671–4708.
- [11] T. Melvin et al. “A mixed finite-element, finite-volume, semi-implicit discretization for atmospheric dynamics: Cartesian geometry”. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 145 (2019), pp. 2835–2853.
- [12] G. Orlando, P.F. Barbante, and L. Bonaventura. “An efficient IMEX-DG solver for the compressible Navier-Stokes equations for non-ideal gases”. *Journal of Computational Physics* 471 (2022), p. 111653.
- [13] G. Orlando, T. Benacchio, and L. Bonaventura. “An IMEX-DG solver for atmospheric dynamics simulations with adaptive mesh refinement”. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 427 (2023), p. 115124.
- [14] G. Orlando, T. Benacchio, and L. Bonaventura. “Impact of curved elements for flows over orography with a Discontinuous Galerkin scheme”. *Journal of Computational Physics* 519 (2024), p. 113445.
- [15] G. Orlando, T. Benacchio, and L. Bonaventura. “Robust and accurate simulations of flows over orography using non-conforming meshes”. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 150 (2024), pp. 4750–4770.
- [16] G. Orlando, T. Benacchio, and L. Bonaventura. “Efficient and scalable atmospheric dynamics simulations using non-conforming meshes”. *Procedia Computer Science* 255 (2025). Proceedings of the Second EuroHPC user day, pp. 33–42.
- [17] G. Orlando and L. Bonaventura. “Asymptotic-preserving IMEX schemes for the Euler equations of non-ideal gases”. *Journal of Computational Physics* 529 (2025), p. 113889.
- [18] G. Orlando, S. Boscarino, and G. Russo. *A quantitative comparison of high-order asymptotic-preserving and asymptotically-accurate IMEX methods for the Euler equations with non-ideal gases*. 2025. arXiv: [2501.12733](https://arxiv.org/abs/2501.12733).
- [19] L. Pareschi and G. Russo. “Implicit-explicit Runge-Kutta schemes and applications to hyperbolic systems with relaxation”. *Journal of Scientific computing* 25 (2005), pp. 129–155.
- [20] J. Steppeler et al. “Review of numerical methods for nonhydrostatic weather prediction models.” *Meteorology and Atmospheric Physics* 82 (2003), pp. 287–301.

- [21] R.S. Varga. *Matrix Iterative Analysis*. Springer Science & Business Media, 2009.