



Dinâmica 20/09/2023 a 18/12/2023


Review

Influencia da Computação Científica na Previsão Numérica de Tempo e Clima .

(Paulo Yoshio Kubota, Ph.D.)

Cachoeira Paulista-SP
CPTEC/INPE
21 Agosto 2023

- 1. Previsão numérica de Tempo.**
 - a. Modelo Matemático (Equações Governantes)**
 - b. Tipo de Grade Numérica**
 - c. Forma de Discretização**



**Qual a relação
Meteorologia-
Computação...**

- 1. Otimização do tempo computacional das PNT.**
 - a. Otimização Serial.**
 - b. Otimização Paralela**
 - c. Paralelismo de Memória Compartilhada usado no MCGA-CPTEC (OpenMP)**
 - d. Paralelismo de Memória Distribuída usado no MCGA-CPTEC (MPI)**

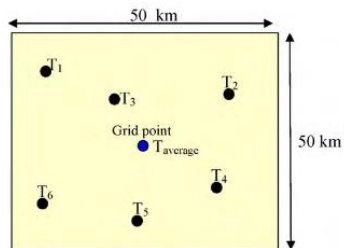
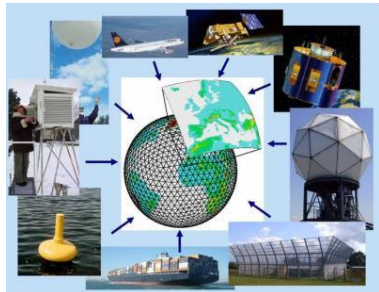


**Que Tipo de Profissional é
Desejado**

- 1. Impacto para Sociedade.**
 - a. Produtos de PNT com Alta Qualidade Com Baixo Custo.**
 - b. Tipo de Supercomputador e Consumo de Energia Elétrica**

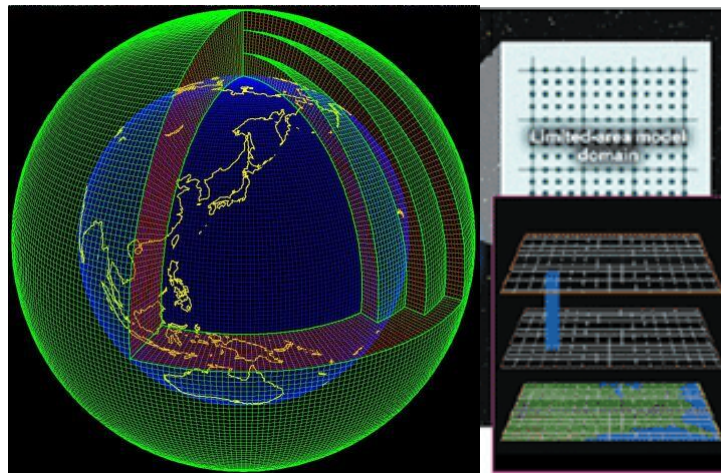


Previsão numérica de Tempo.



- Observation points
- Model grid points

Fig. 2. 50 km grid box, represents area of 2500 km².



Equações Primitivas

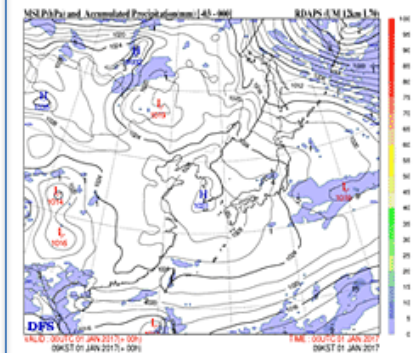
$$\frac{Du}{Dt} - fv = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + F_x$$

$$\frac{Dv}{Dt} + fu = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + F_y$$

$$\frac{Dw}{Dt} = g - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + F_z$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = 0$$



Observação

Modelo Numérico

Previsão

Equações governantes do estado médio



Média de Reynolds $A = \bar{A} + A'$

Nas equações de Navier Stokes



lei do gas

$$\bar{p} = \bar{\rho} R_d \bar{T}_v$$

$$\bar{T}_v = T(1 + 0.61q_v - q_l)$$

Necessita ser parametrizado !

Temperatura virtual

2nd ordem



momentum

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\delta_{i3}g + f_c \varepsilon_{ij3} \bar{u}_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\nu \partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial (\bar{u}'_i \bar{u}'_j)}{\partial x_j}$$

Advecção media

gravidade

Coriolis

Gradiente de Pressão

Estresse Viscoso

Transporte Turbulento



Eq. Continuidade

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0$$



Calor

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} =$$

Advecção media

$$\frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial \bar{F}_j}{\partial x_j}$$

radiação

$$\frac{\partial (\bar{u}'_j \bar{\theta}')}{\partial x_j}$$

Transporte Turbulento

$$- \frac{L_v E}{\rho c_p}$$

Liberção de Calor



Agua Total

$$\frac{\partial \bar{q}_t}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{q}_t}{\partial x_j} =$$

Advecção media

precipitação

$$\frac{\partial (\bar{u}'_j \bar{q}'_t)}{\partial x_j}$$

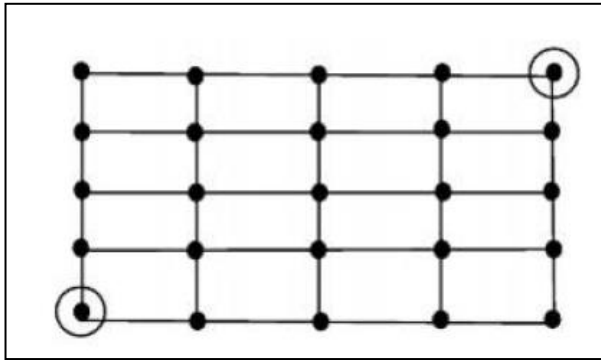
Transporte Turbulento

Discretização



ESTRUTURADA

(consiste de retângulos 2D)

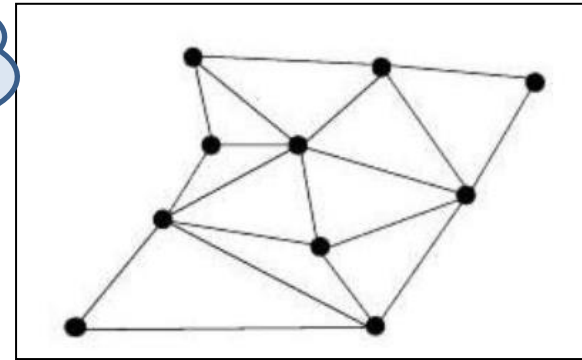


Onde
Discretizar?



NÃO-ESTRUTURADA

(consiste de triângulos 2D)



Vantagens:

- A indexação sozinha, mostra uma conectividade limpa,
- Fácil de manipular os índices e armazenar na computação

Desvantagens:

- Restrições à ortogonalidade e razão de aspecto.
- Difícil envolver geometrias complexas.
- Menos eficiente para malhas localmente refinadas.

Vantagens:

- Informações de conectividade para cada célula precisam ser armazenadas
- Difícil de armazenar e manipular dados na computação

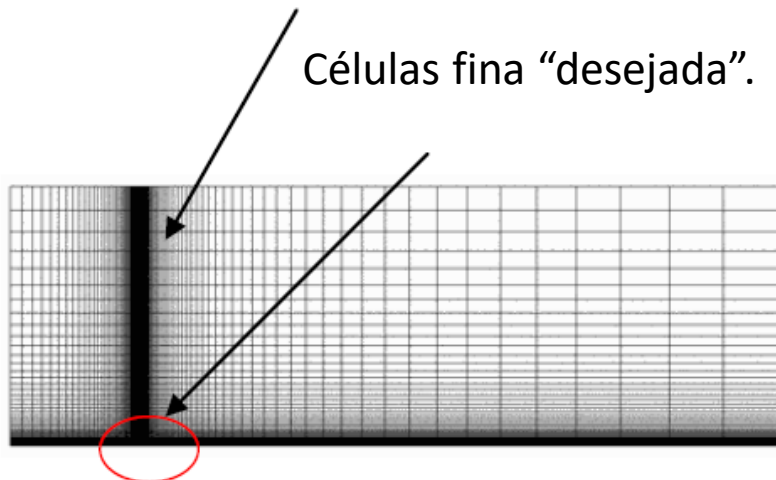
Desvantagens:

- Mais fácil envolver forma complexas.
- Muito eficiente para malhas localmente refinadas

Tipo de Malha Numérica

ESTRUTURADA

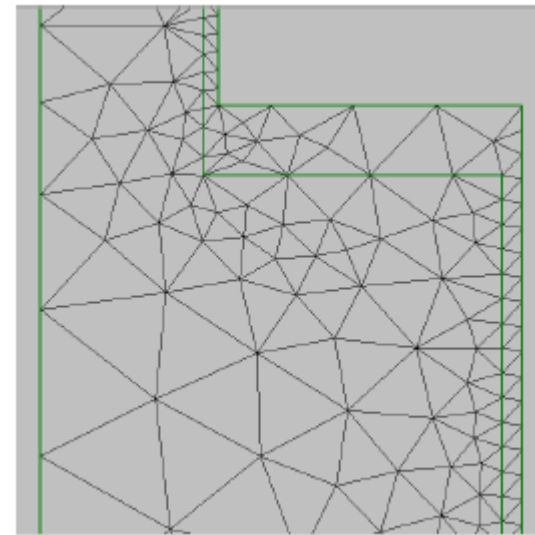
(consistes de retângulos 2D)



- Geração de Malha (Difícil e manual)
- Usada para Diferença Finitas , e Volume finito

NÃO-ESTRUTURADA

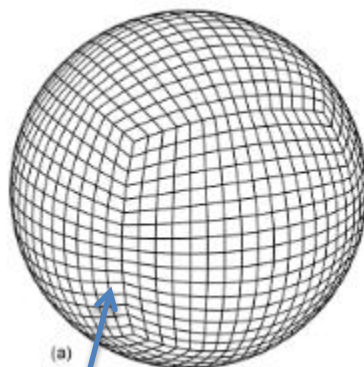
(consistes de triângulos 2D)



- Geração de Malha (Facil e geralmente automatica)
- Usada para Elemento Finitos e Volume finito

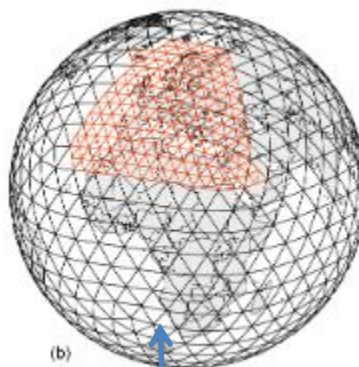


Tipo de Malha Numérica



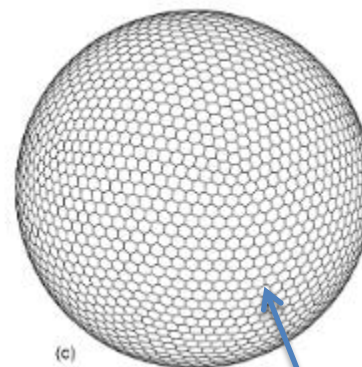
(a)

a) Esfera cubada



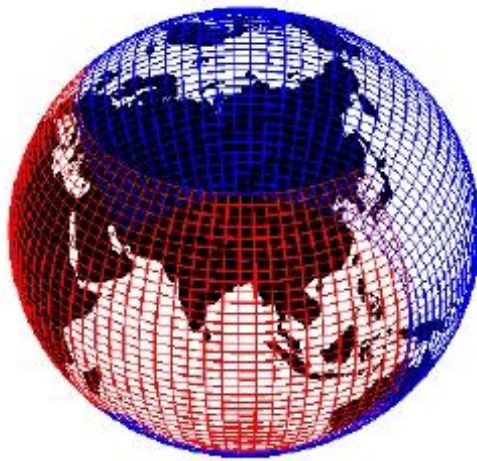
(b)

b) Icosaédrica triangular



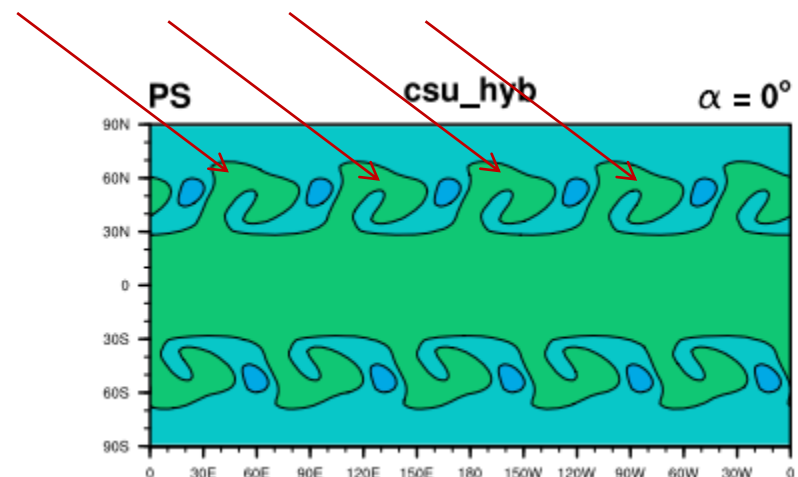
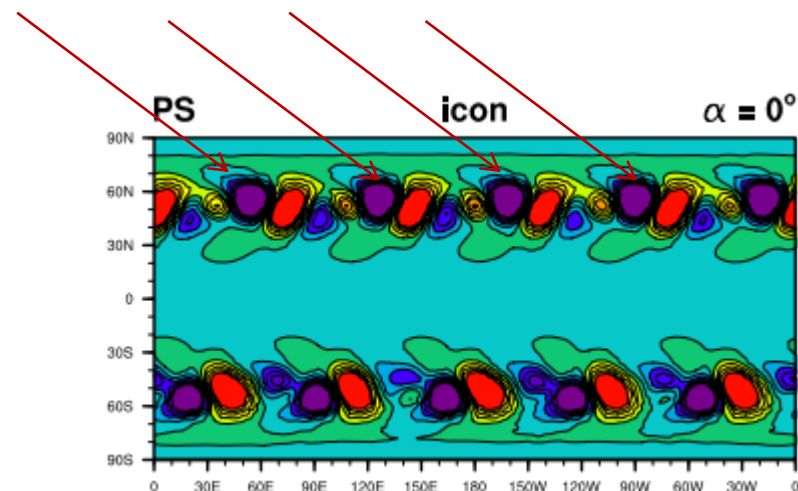
(c)

c) Icosaédrica hexagonal



Métodos Numéricos: Problemas

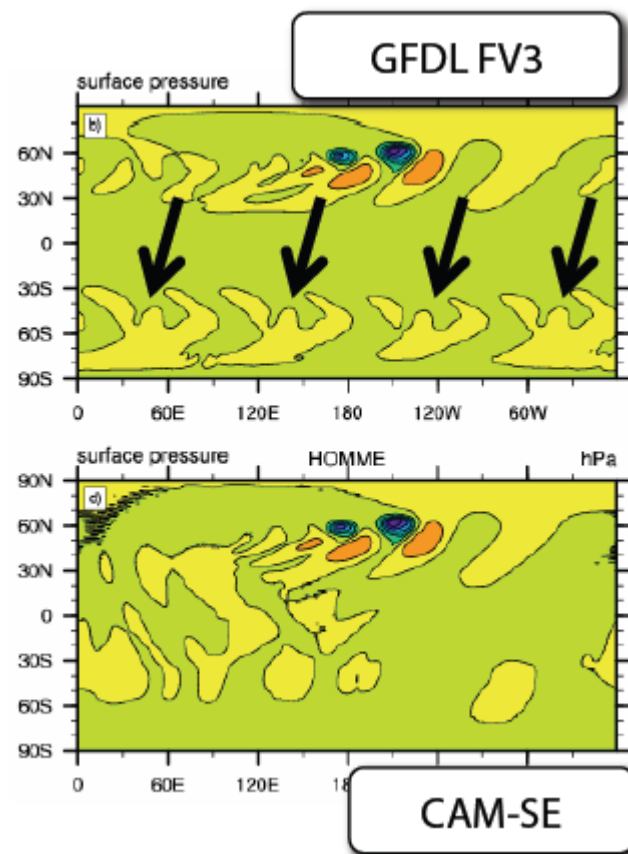
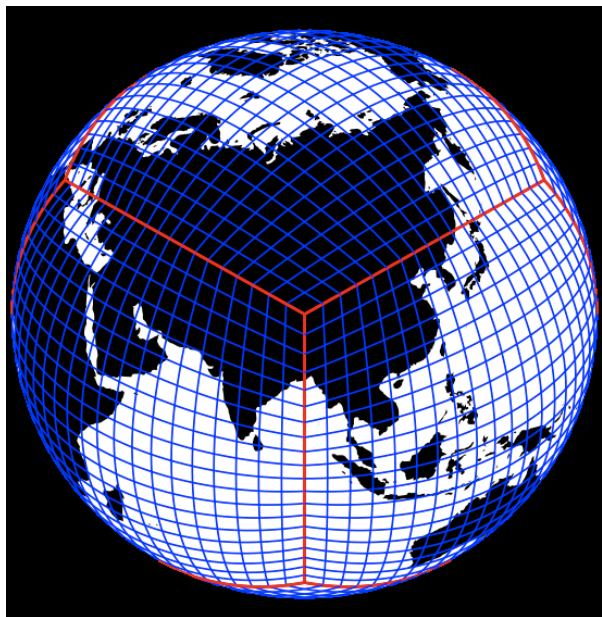
Ambos os modelos **OLAM**, **ICON** e **CSU** são construídos em uma grade icosaédrica (resultados da oficina de 2008). Isso leva a um **realce** do modo de onda **$k = 5$** .



Métodos Numéricos: Problemas

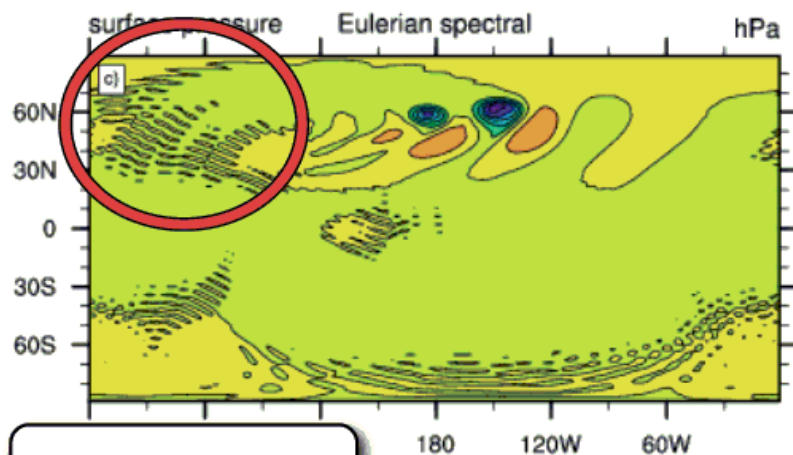
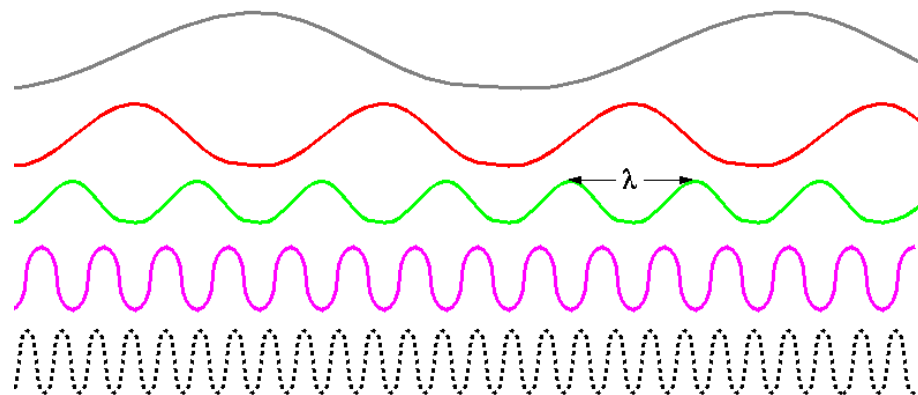
Tanto o modelo **GFDL FV3** (FVcubed) como o modelo **CAM-SE** (elemento espectral) são construídos na **esfera em cubos**. Isso leva a um **realce** do modo de onda **$k = 4$** .

O uso de alta ordem numérica no CAM-SE é mais eficaz para reprimir este modo.

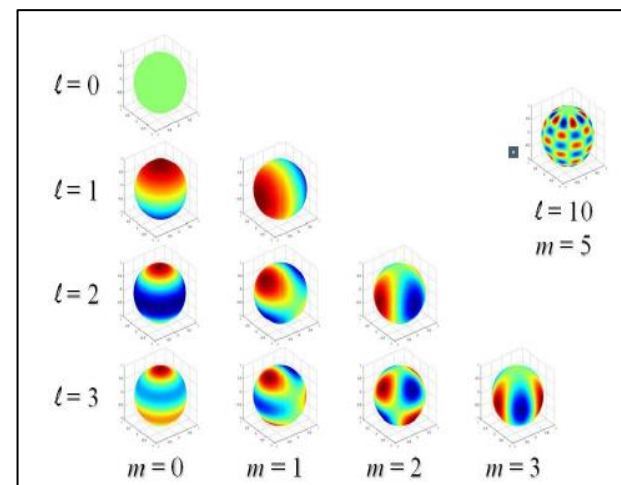


Métodos Numéricos: Problemas

CAM-EUL (Euleriana) e BAM usam métodos espectrais, que são conhecidos por serem sensíveis ao ruído espectral. Este ruído é caracterizado por oscilações rápidas devido ao realce do modo de alta frequência.



CAM-EUL

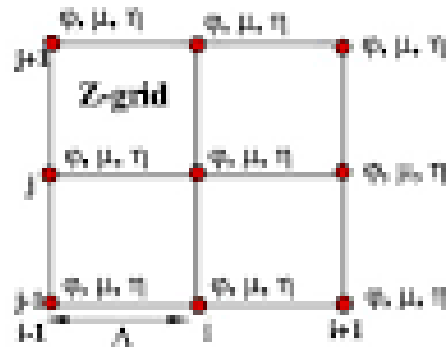
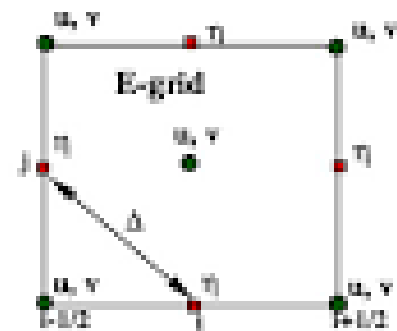
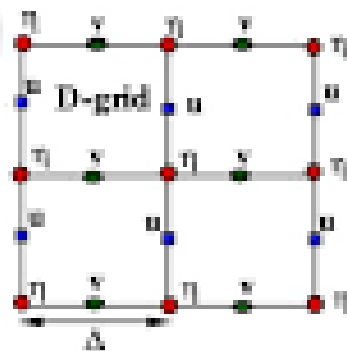
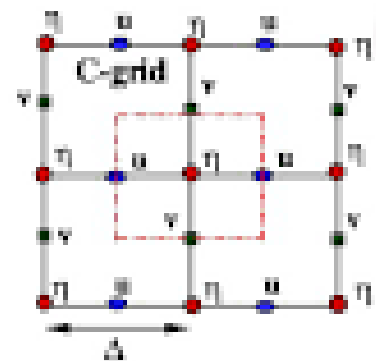
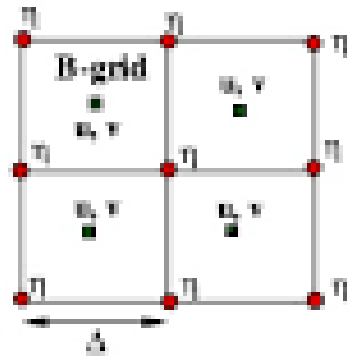
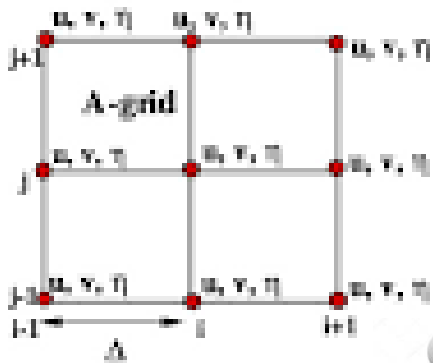


MPAS-Malha de Voronoi???

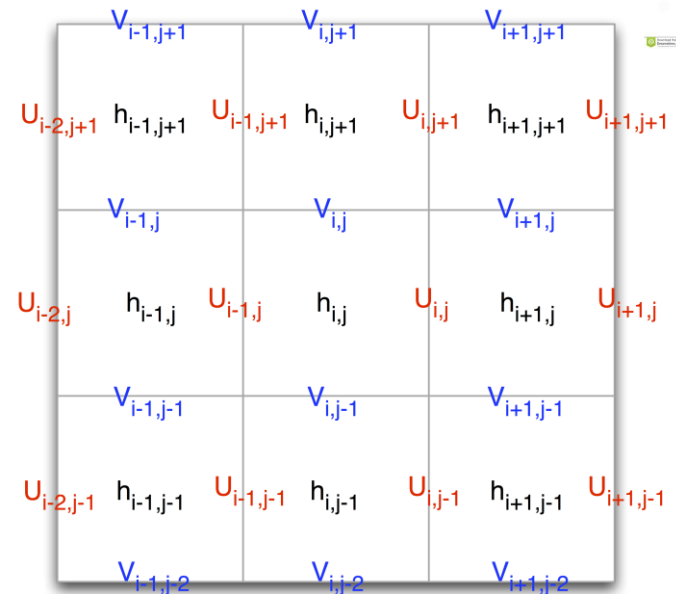


Tipo de Grade Numérica

Porque Diferentes grades



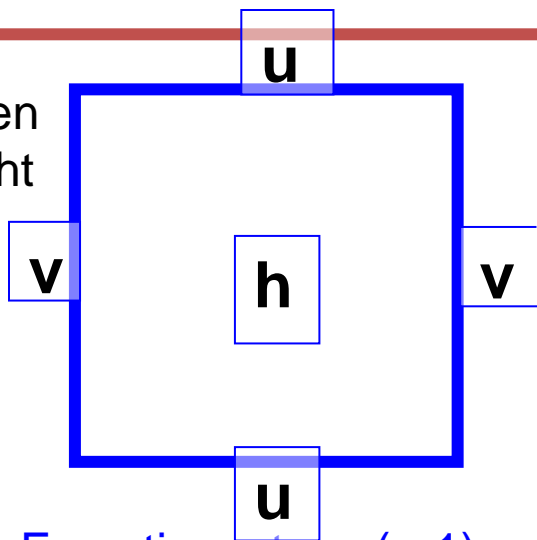
Melhorar a estabilidade e a conservação. Massa, Energia..



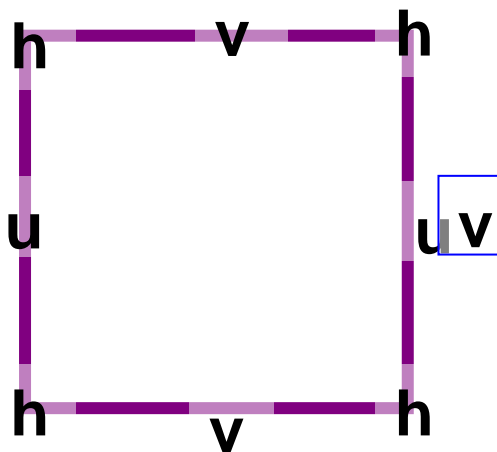


Tipo de Malha Numérica (Grade Eliassen)

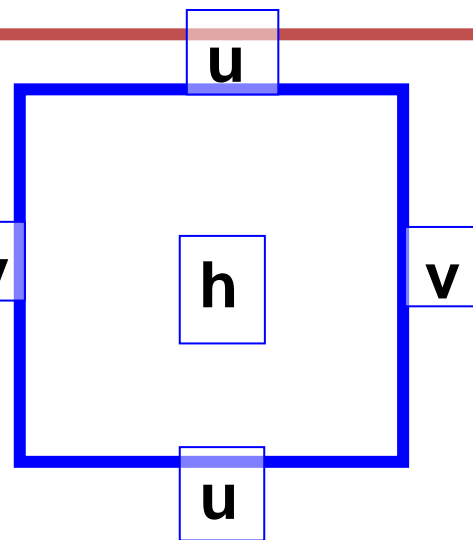
Geopotential height eq.



Even time steps ($n-1$)

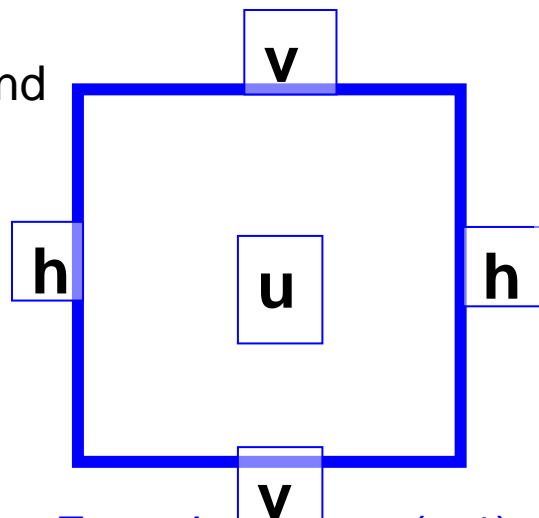


Odd time steps (n)

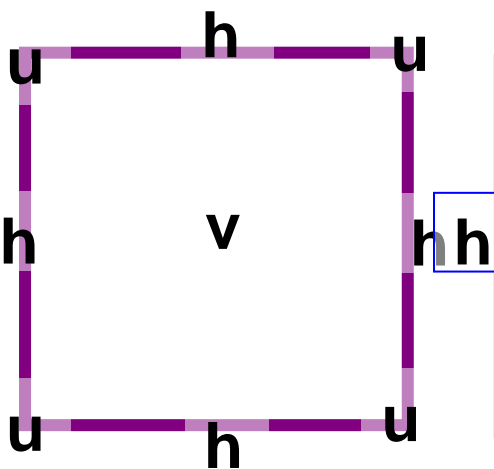


Even time steps ($n+1$)

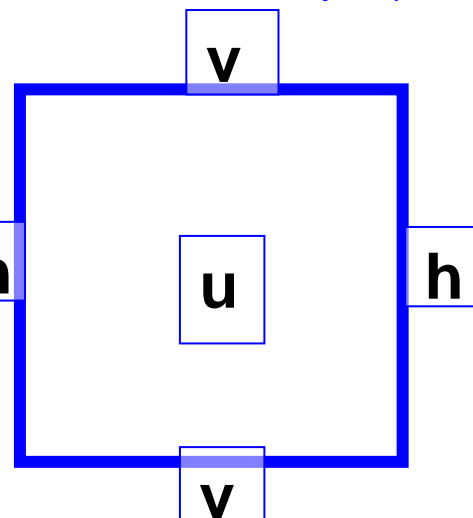
Zonal wind eq.



Even time steps ($n-1$)



Odd time steps (n)



Even time steps ($n+1$)

1. Método de Diferenças Finitas: **BRAMS**, WRF (forma DE FLUX)

Qual as
Formas de
Discretização
...

2. Método de Volume Finito: (ETA**)

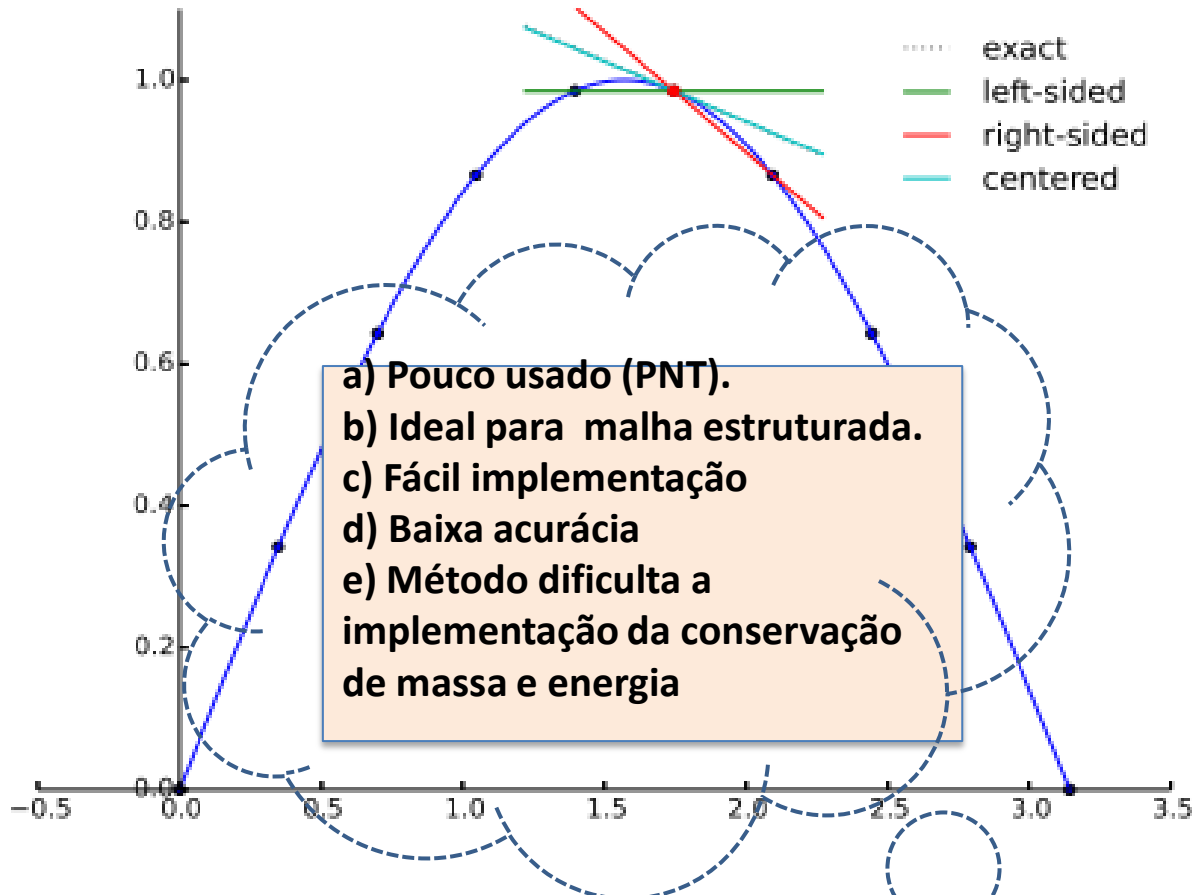
3. Método de Elementos Finitos (CAM-SE)

4. Método de Espectral: (BAM)

USADO NO
CPTEC e
no Futuro...



1. Método de Diferenças Finitas:



$V_{i-1,j+1}$	$V_{i,j+1}$	$V_{i+1,j+1}$
$U_{i-2,j+1}$ $h_{i-1,j+1}$	$U_{i-1,j+1}$ $h_{i,j+1}$	$U_{i,j+1}$ $h_{i+1,j+1}$
$V_{i-1,j}$	$V_{i,j}$	$V_{i+1,j}$
$U_{i-2,j}$ $h_{i-1,j}$	$U_{i-1,j}$ $h_{i,j}$	$U_{i,j}$ $h_{i+1,j}$
$V_{i-1,j-1}$	$V_{i,j-1}$	$V_{i+1,j-1}$
$U_{i-2,j-1}$ $h_{i-1,j-1}$	$U_{i-1,j-1}$ $h_{i,j-1}$	$U_{i,j-1}$ $h_{i+1,j-1}$
$V_{i-1,j-2}$	$V_{i,j-2}$	$V_{i+1,j-2}$

$$\left. \frac{da}{dx} \right|_i \approx \frac{a_i - a_{i-1}}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{da}{dx} \right|_i \approx \frac{a_{i+1} - a_i}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{da}{dx} \right|_i \approx \frac{a_{i+1} - a_{i-1}}{2\Delta x}$$



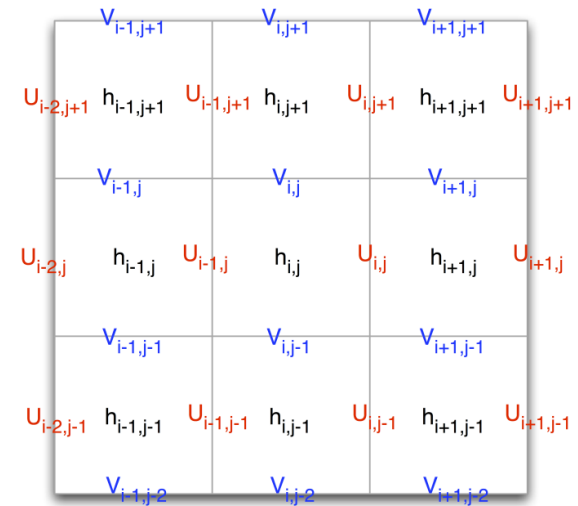
A lei de conservação

1. Método de Volume Finito:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{J} \nabla \cdot \vec{F} = S$$

Integra sobre um elemento Z com contorno ∂Z a aplicando o teorema da divergência. Teremos:

- a) Muito usado (PNT).
- b) Ideal para malha estruturada e não estruturada .
- c) Implementação mais elaborada
- d) Alta acurácia (depende do graus)
- e) Método facilita a conservação de massa e energia



$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t}$$

+

$$\oint_{\partial Z} \vec{F} \cdot \vec{n} ds$$

=

$$\int_Z S dV$$

Evolução no tempo do estado do elemento médio

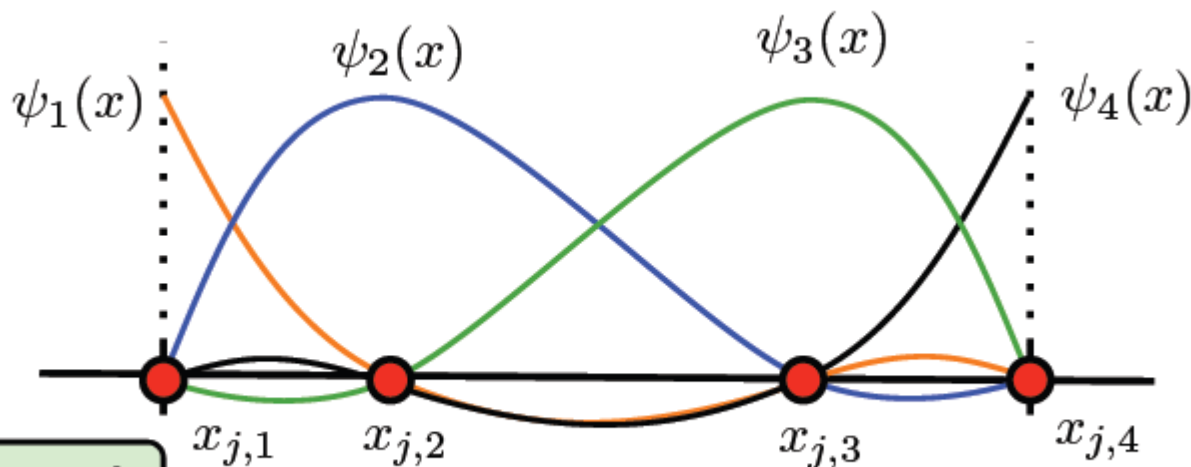
Fluxo Através do elemento de contorno

Temo Fonte do elemento médio

1. Método de Elementos Finitos:

$$q(x, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \psi_n(x)$$

Funções
Básicas do
Elemento J



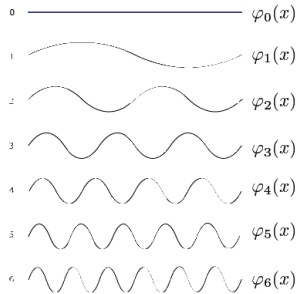
Element j

- a) Pouco usado (PNT).
- b) Ideal para malha não estruturada.
- c) Implementação bem elaborada
- d) Alta acurácia
- e) Método facilita a conservação de massa e energia

$V_{i-1,j+1}$	$V_{i,j+1}$	$V_{i+1,j+1}$
$U_{i-2,j+1}$ $h_{i-1,j+1}$	$U_{i-1,j+1}$ $h_{i,j+1}$	$U_{i,j+1}$ $h_{i+1,j+1}$ $U_{i+1,j+1}$
$V_{i-1,j}$	$V_{i,j}$	$V_{i+1,j}$
$U_{i-2,j}$ $h_{i-1,j}$	$U_{i-1,j}$ $h_{i,j}$	$U_{i,j}$ $h_{i+1,j}$ $U_{i+1,j}$
$V_{i-1,j-1}$	$V_{i,j-1}$	$V_{i+1,j-1}$
$U_{i-2,j-1}$ $h_{i-1,j-1}$	$U_{i-1,j-1}$ $h_{i,j-1}$	$U_{i,j-1}$ $h_{i+1,j-1}$ $U_{i+1,j-1}$
$V_{i-1,j-2}$	$V_{i,j-2}$	$V_{i+1,j-2}$



1. Método de Espectral:



$$\phi(x,t) = \sum_{k=1}^N a_k(t) \phi_k(x)$$

$$\psi_k(x) = e^{-ikx}$$

Harmônico Linear: Ortogonalidade

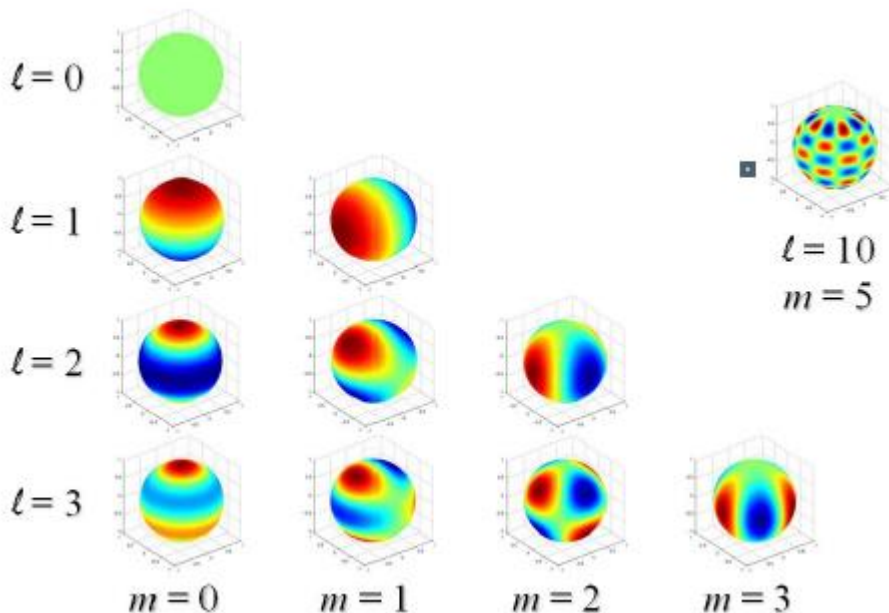
$$\int_S \psi_k \psi_n dS = \begin{cases} 2\pi, & \text{se } k = n \\ 0, & \text{se } k \neq n \end{cases}$$

Harmônicos Esféricos: Ortogonalidade

$$\int_S \phi_{l,m} \phi_{k,n} dS = \begin{cases} I_{l,m}, & k = l \text{ e } m = n \\ 0, & k \neq l \text{ ou } m \neq n \end{cases}$$

$$\begin{matrix} k = l & \text{e} & m = n \\ k \neq l & \text{ou} & m \neq n \end{matrix}$$

a) Muito usado antigamente (PNT).
c) Implementação bem elaborada
d) Alta acurácia
e) Método facilita a conservação de massa.



1. Otimização do tempo computacional das PNT.

a. Otimização Serial.

b. Otimização Paralela

c. Paralelismo de Memória Compartilhada usado no **MCGA-CPTEC** (OpenMP)

d. Paralelismo de Memória Distribuída usado no **MCGA-CPTEC** (MPI)

e. Processamento me **GPU** (**OPENACC**)





Otimização Serial

Compilers:

(Intel, PGI, CRAY, GNU, etc.)

Libraries:

(LAPCK, BLAS, etc)

COMO Otimizar o código serial

Para Escrever um Código Otimizado:

- a) eficiência do algoritmo,
- b) como o executável explora a arquitetura do processador

Instrução e Otimização do paralelismo de dados:

- a) **pipelines**: (decompõe a instrução de ponto flutuante em estágios.)
- b) **vector registers**: (um pipeline pode operar em um conjunto de dados de ponto flutuante usando registros amplos)



Cache optimisation

- a) **Temporal**: (múltiplo uso do mesmo item de dados em um curto período de tempo enquanto os dados residem na memória cache.)
- b) **Spatial**: (refere-se ao uso de dados localizados em um bloco de endereços consecutivos)

Gerenciamento de Memória

Gerenciar a alocação dinâmica de memória nas funções e subrotinas



Diferentes tipos de abordagens:

* **MPI** (paralelismo de memória distribuída)
(BAM,ETA,BRAM,WRF)

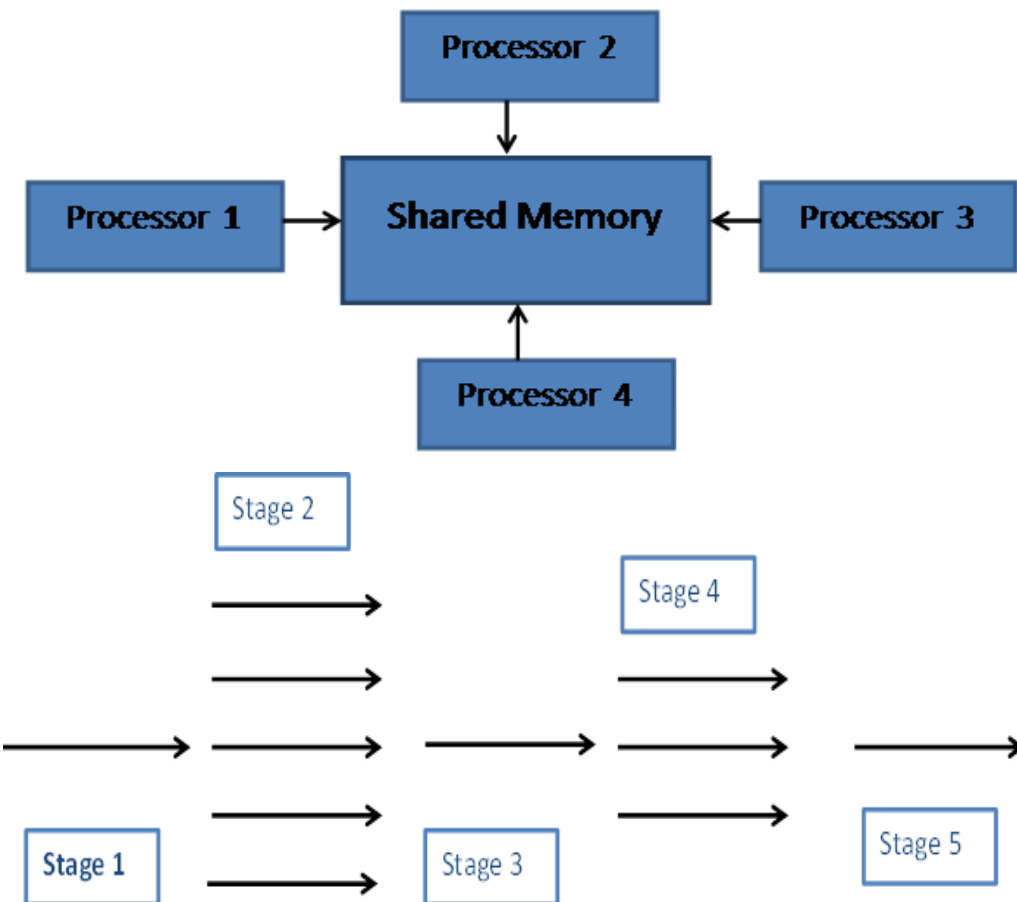
* **OpenMP / OpenACC*** (paralelismo incremental / fácil,
memória compartilhada)(BAM, BRAMS*)

CUDA (E uma tecnologia proprietária da Nvidia. Desenvolvida especificamente para as GPUs Nvidia)

OpenCL (paralelismo massivo heterogêneo)

* **Usado nos modelos do CPTEC**

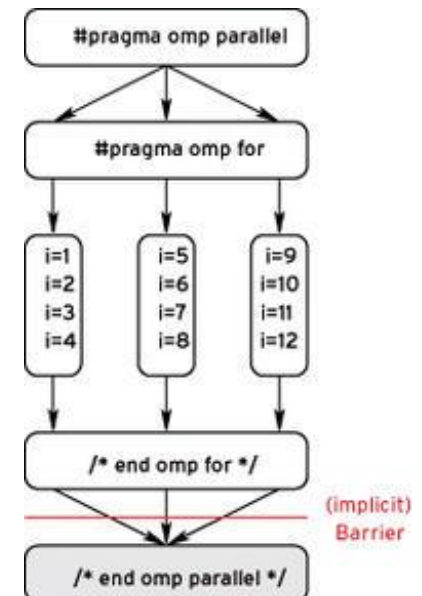
OpenMP (paralelismo incremental / fácil, memória compartilhada)



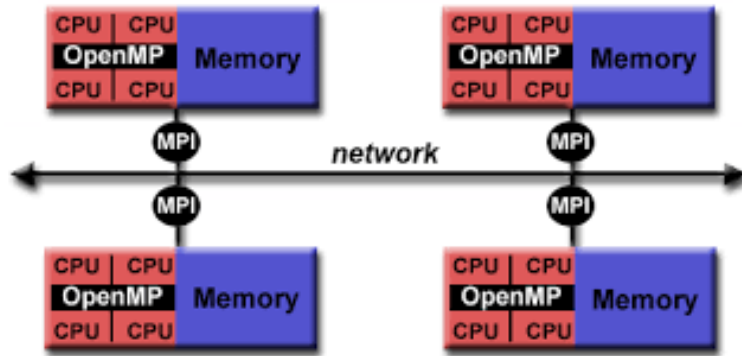
Program hybrid

```
call OMP_SET_NUM_THREADS(4)
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(i)
!$OMP&                                SHARED(n)
  do i=1,n
    ... computation
  enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

end



MPI (paralelismo de memória distribuída)



A Pseudo Hybrid Code

Program hybrid

```
call MPI_INIT (ierr)
```

```
call MPI_COMM_RANK (...)
```

```
call MPI_COMM_SIZE (...)
```

... some computation and MPI communication

```
call OMP_SET_NUM_THREADS(4)
```

```
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(i)
```

```
!$OMP&                               SHARED(n)
```

```
do i=1,n
```

```
... computation
```

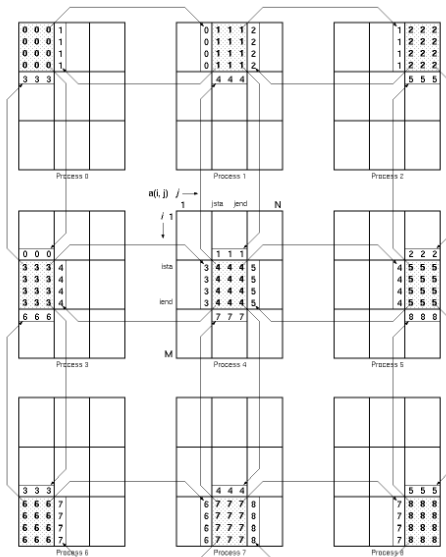
```
enddo
```

```
!$OMP END PARALLEL DO
```

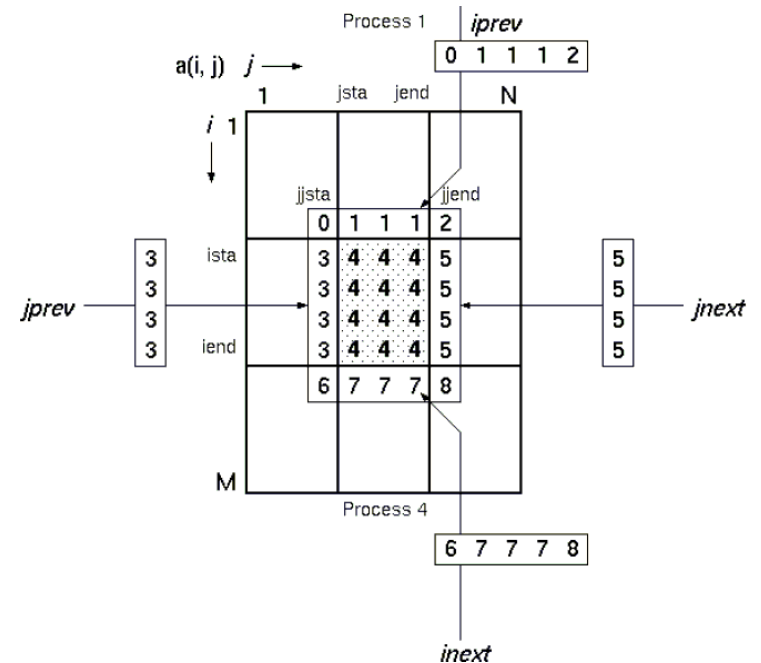
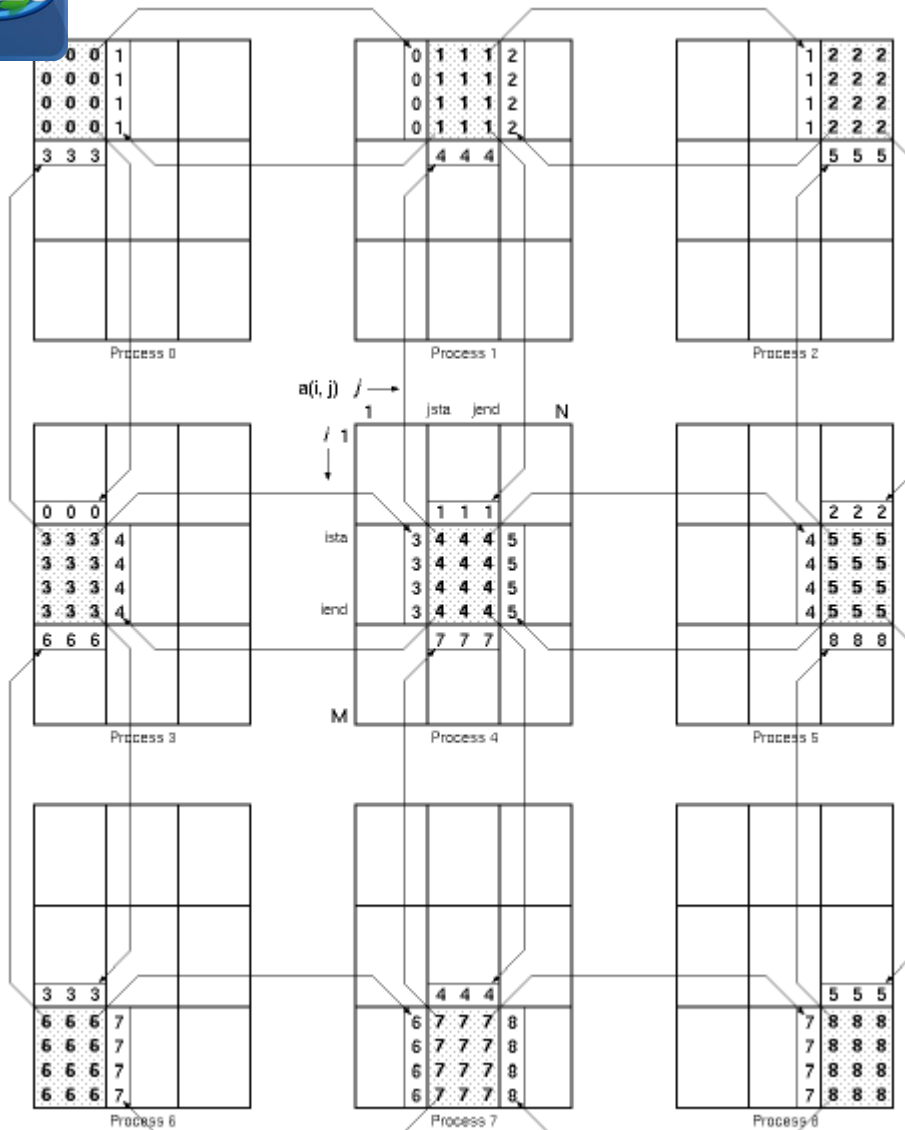
... some computation and MPI communication

```
call MPI_FINALIZE (ierr)
```

```
end
```



MPI (paralelismo de memória distribuída)





MPI (paralelismo de memória distribuída)

```
CALL MPI_ISEND (a(ista,jend),ilen,MPI_REAL8,jnext,1,MPI_COMM_WORLD,isend1,ierr)
CALL MPI_ISEND (a(ista,jsta),ilen,MPI_REAL8,jprev,1,MPI_COMM_WORLD,isend2,ierr)
CALL MPI_ISEND (works1(jsta),jlen,MPI_REAL8,inext,1,MPI_COMM_WORLD,jsend1,ierr)
CALL MPI_ISEND (works2(jsta),jlen,MPI_REAL8,iprev,1,MPI_COMM_WORLD,jsend2,ierr)

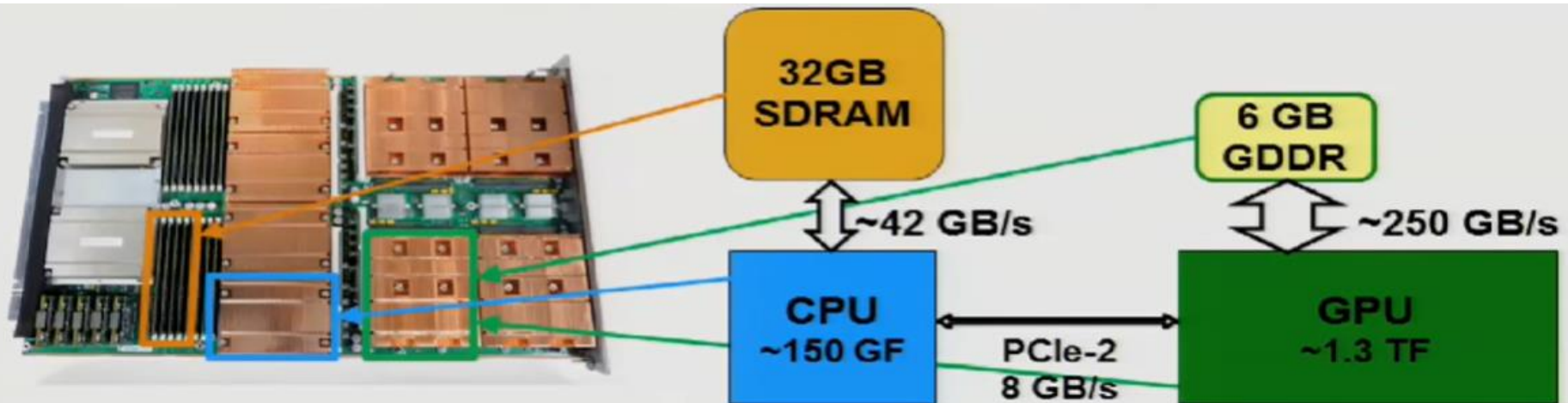
CALL MPI_IRECV (a(ista,jsta-1),ilen,MPI_REAL8,jprev,1,MPI_COMM_WORLD,irecv1,ierr)
CALL MPI_IRECV (a(ista,jend+1),ilen,MPI_REAL8,jnext,1,MPI_COMM_WORLD,irecv2,ierr)
CALL MPI_IRECV (workr1(jsta) ,jlen,MPI_REAL8,iprev,1,MPI_COMM_WORLD,jrecv1,ierr)
CALL MPI_IRECV (workr2(jsta) ,jlen,MPI_REAL8,inext,1,MPI_COMM_WORLD,jrecv2,ierr)

CALL MPI_WAIT (isend1, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (isend2, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (jsend1, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (jsend2, istatus, ierr)

CALL MPI_WAIT (irecv1, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (irecv2, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (jrecv1, istatus, ierr)
CALL MPI_WAIT (jrecv2, istatus, ierr)
```

Qual a velocidade das GPUs atuais?

1. Cuidado com o exagero: "Ganhei 1000x de aceleração em uma GPU"
2. O que você deve esperar?
3. Cray XK7.
 - a) Flop / s GPU ~ 9x mais rápido do que CPU inteira com (16 núcleos)
 - b) A memória da Largura de banda: GPU -6x mais rápida que a CPU.
1. Essas proporções serão semelhantes em outros sistemas
- 2 - Além disso, é mais difícil alcançar o desempenho máximo na GPU.
 - a) Seu código precisa para se ajustar à arquitetura.
 - b) Você também precisa levar em consideração as transferências de dados entre a CPU e a GPU.



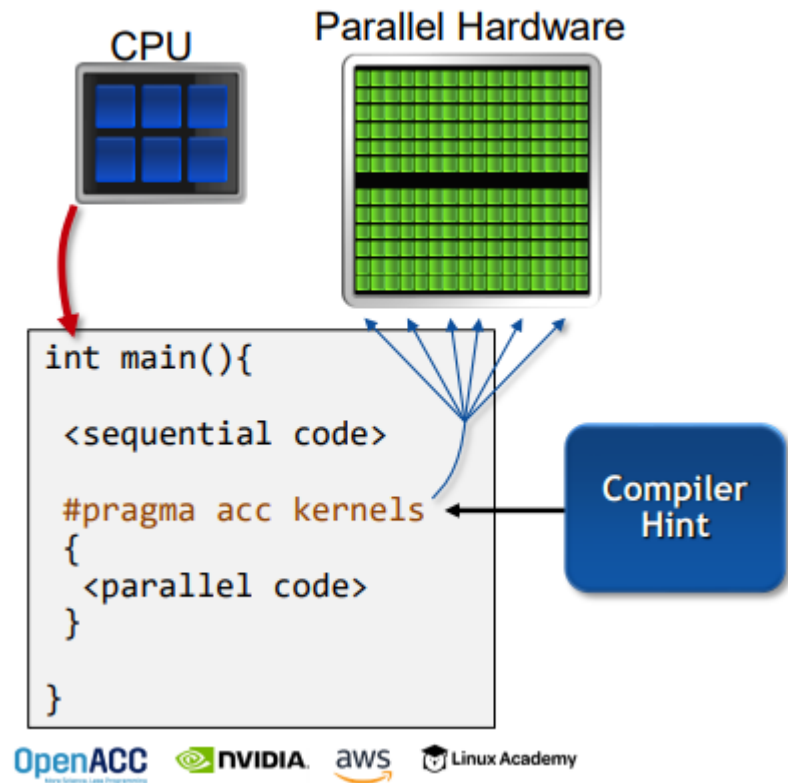
Parallelizing a single loop

C/C++

```
#pragma acc parallel loop
for(int i = 0; i < N; i++)
    a[i] = 0;
```

Fortran

```
!$acc parallel loop
do i = 1, N
    a(i) = 0
end do
```



O programador dá o sinal ao compilador.
O compilador paraleliza o código.



Impacto para Sociedade.

a. Produtos de PNT com Alta Qualidade Com Baixo Custo.

b. Tipo de Supercomputador e Consumo de Energia Elétrica

Produtos de PNT com Alta Qualidade Com Baixo Custo.



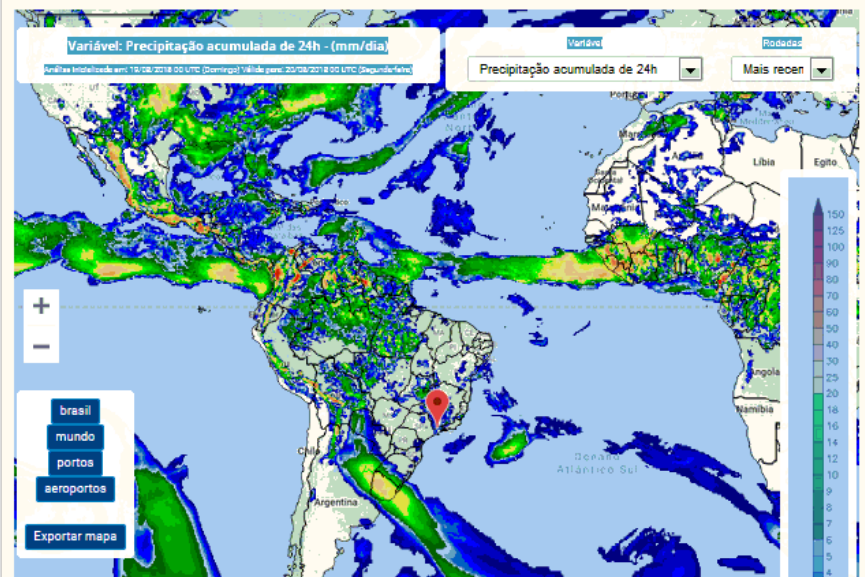
Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos

INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

Tempo Clima Previsão Numérica Satélite Ondas Dados Observacionais Instrumentação Meteorológica Qualidade do Ar Pós Graduação

MAPAS BRASIL

BAM 20x20 km Eta 05x05 km WRF-05x05 km Ensemble Ensemble Controle Meteogramas



Porcentagem do Tempo de Execução relacionado ao TUPÃ

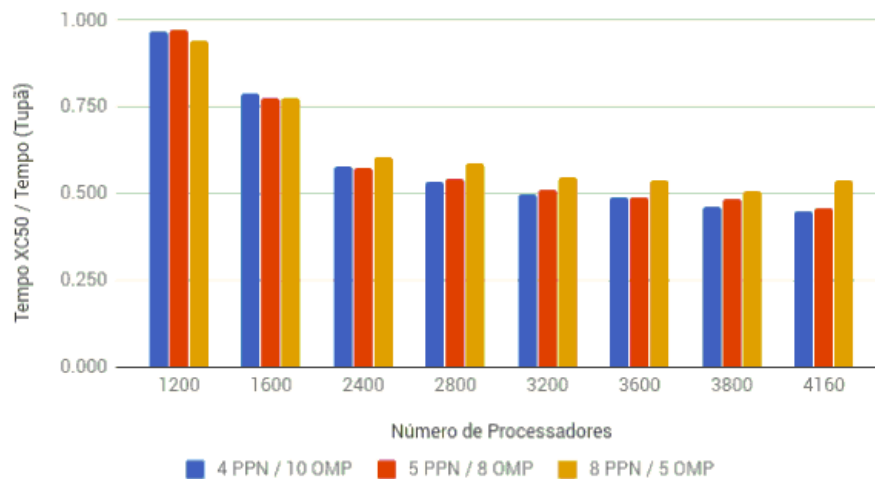


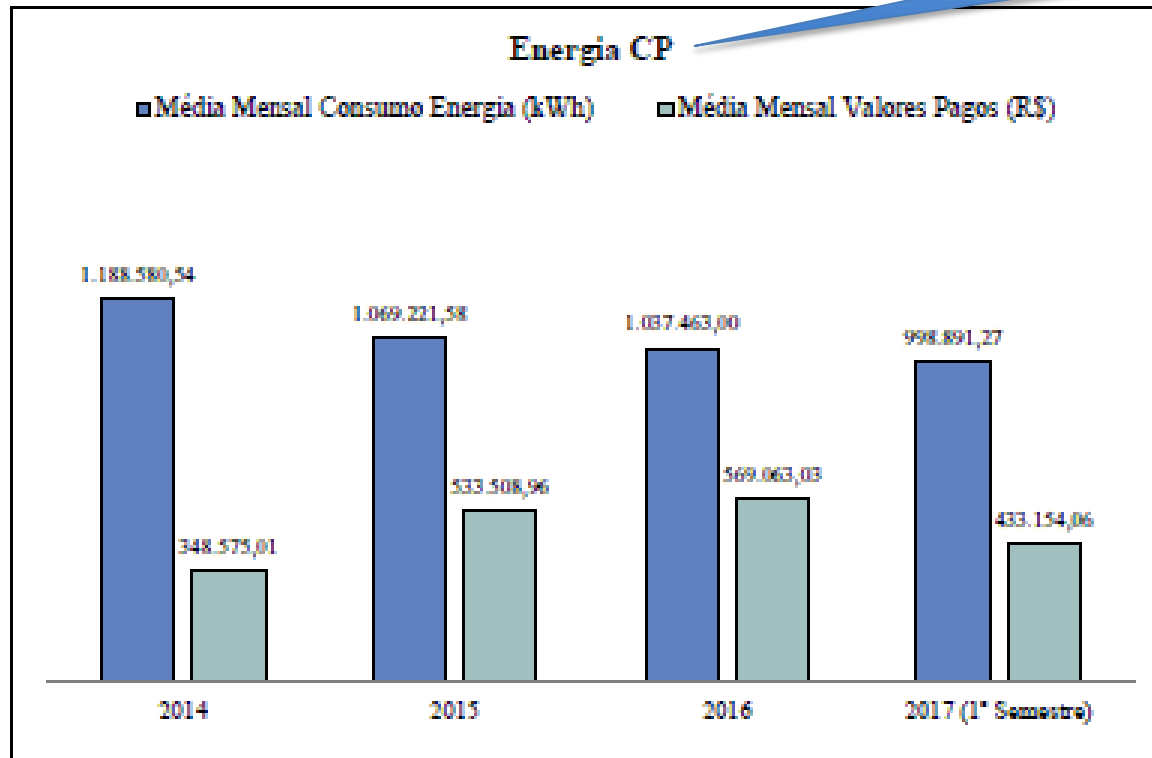
Fig.2: Relação entre o tempo de execução operacional no Tupã XE6 e no upgrade XC50 (Tempo XE6/Tempo XC50), com as diferentes configurações de MPI por nó (PPN) e threads OMP (OMP).

Tipo de Supercomputador e Consumo de Energia Elétrica



No Gráfico 8 observa-se a comparação entre a redução no consumo e os pagamentos realizados para o período de 2014 a junho de 2017 pela unidade CP.

~70% gasto pelo tupa



Modelo de PNT e Supercomputadores mais eficientes promovem um consumo menor de energia,

Gráfico 8 – Média Mensal do Consumo de Energia em kWh de janeiro de 2014 a junho de 2017 no INPE-CP