

Introducción_Ometeotl_2025 - Tlaloc

Ingreso a Clúster y sesión de trabajo.

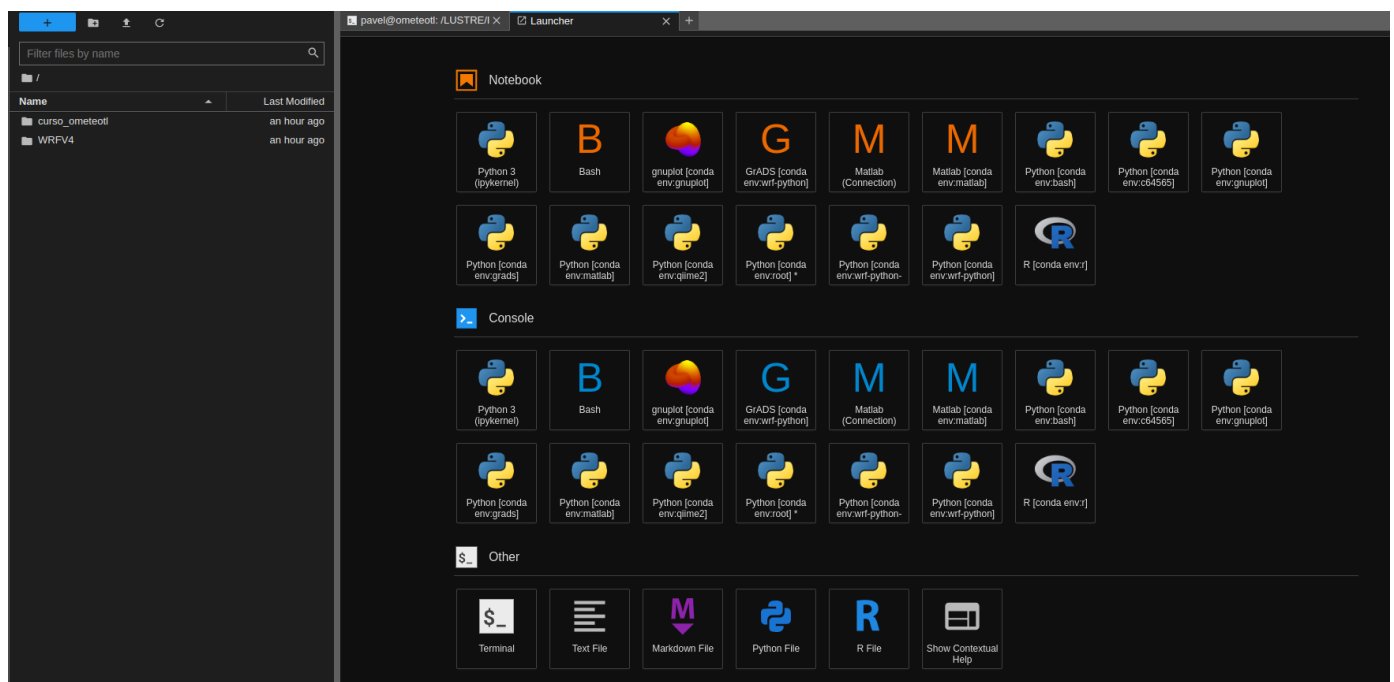
Elaboró: Pável Ernesto Oropeza Alfaro (poropeza@atmosfera.unam.mx)

Sesión 1

SSH y Bash

☐ Ingreso por SSH: `ssh -l usuario_cluster tlaloc.atmosfera.unam.mx`

☐ Ingreso vía interfaz JupyterLab: `https://tlaloc.atmosfera.unam.mx/jupyteri`



☐ Herramientas y comandos UNIX, editores de texto, entorno bash

☐ Variables de entorno

☐ módulos de software

Breve descripción del Clúster:

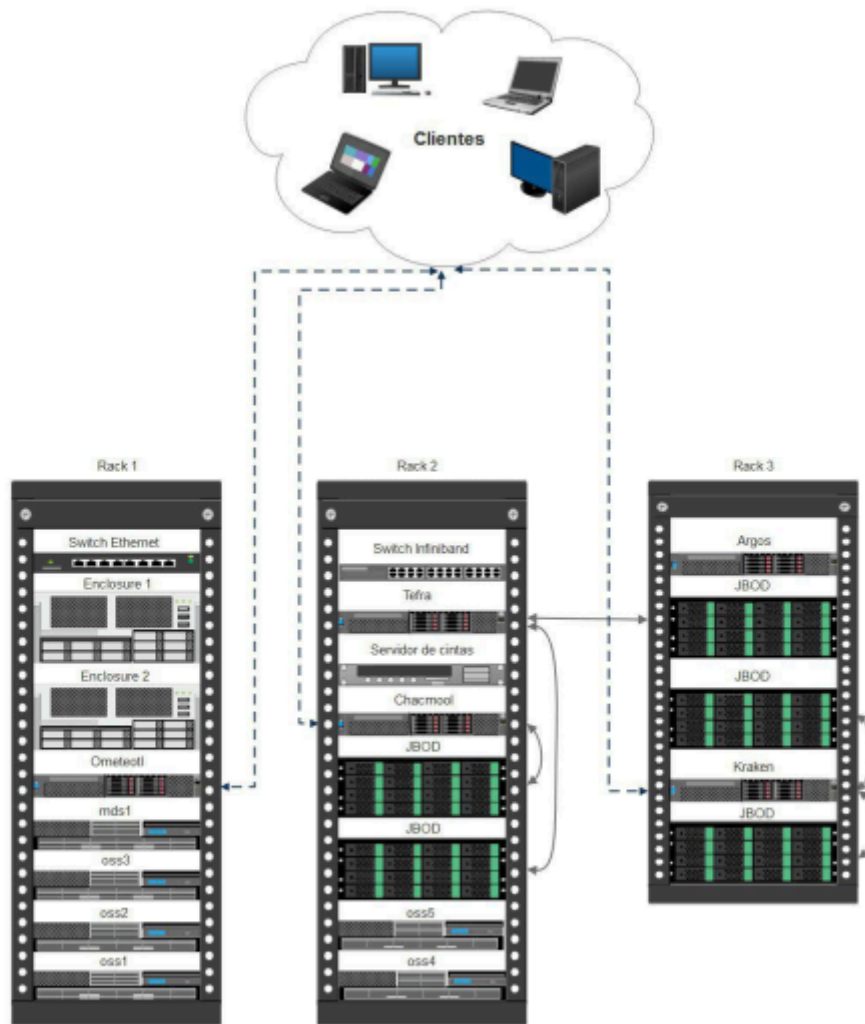


Figure 1: Clúster Ometeotl y servidores de almacenamiento

Software disponible y organización mediante Módulos de software

Para habilitar el entorno de ejecución del modelo WRF es necesario seguir un orden para cargar los módulos que harán que la versión de WRF 4 deseada se encuentre disponible.

A continuación se describe el proceso:

- ☐ Cargar módulos según orden y jerarquía. Se empieza por cargar el compilador:

```
m1 load intel/2022u2
```

- ☐ Módulos de bibliotecas requeridas por WRF

```
m1 load curl hdf5 jasper libaec libpng mpi netcdf-c netcdf-fortran zlib
```

- ☐ Carga de módulo del modelo WRF, versión 4.2.1

`m1 wrf/4.2.1`. Si se desea salvar este orden de carga de módulos de software, ejecutar la siguiente instrucción: `m1 save wrf-operativo`. En una sesión posterior, se puede invocar nuevamente a todos los módulos anteriores ejecutando la siguiente instrucción:

```
m1 restore wrf-operativo
```

```
{pronostico} ~/WRFV4
(operativo)-[26]: ml list

Currently Loaded Modules:
  1) intel/2022u2/compilers   3) zlib/1.2.12   5) curl/7.82.0   7) jasper/1.900.22   9) netcdf-c/4.8.1   11) wrf/4.2.1
  2) mpi/intel               4) libaec/1.0.6   6) libpng/1.6.37  8) hdf5/1.10.8      10) netcdf-fortran/4.5.4
```

☐ Verificación de variables \$PATH y \$LD_LIBRARY_PATH

☐ `type -a wrf.exe; echo $PATH`

WRF (ejecutables para experimentos)

☐ `geogrid.exe, ungrib.exe, metgrid.exe, real.exe, ndown.exe y wrf.exe`

```
encit00@ometeotl:~$ type -a geogrid.exe ungrib.exe metgrid.exe real.exe ndown.exe wrf.exe
geogrid.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WPS/bin/geogrid.exe
ungrib.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WPS/bin/ungrib.exe
metgrid.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WPS/bin/metgrid.exe
real.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WRFV4/main/real.exe
ndown.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WRFV4/main/ndown.exe
wrf.exe is /LUSTRE/OPERATIVO/OPERATIVO02/modelos2/WRF/WRFV4/main/wrf.exe
```

Sesión 2

A continuación se describe un ejemplo de ejecución del modelo WRF, iniciando desde la etapa del Preprocesamiento (WPS).

- Estructura de directorios para WRF:

CREAR LA SIGUIENTE ESTRUCTURA DE DIRECTORIOS Y ARCHIVOS:

`cd`

Repositorio GitHub: Archivos namelist, configuración y scripts:

`git clone https://github.com/paveloropeza/curso_ometeotl.git`

`mkdir -p ~/WRFV4/{WPS/geogrid,WPS/metgrid}`

`mkdir ~/WRFV4/WRF`

`cp curso_ometeotl/WRF/config/namelist/namelist.wps ~/WRFV4/WPS`

`cp curso_ometeotl/WRF/config/namelist/namelist.input ~/WRFV4/WRF`

`cd ~/WRFV4/WPS/geogrid`

`cp ~/curso_ometeotl/WRF/config/GEOGRID.TBL .`

`cd ../metgrid`

`cp ~/curso_ometeotl/WRF/config/METGRID.TBL .`

`cd ..`

`cp ~/curso_ometeotl/WRF/config/Vtable.GFS Vtable`

`cp ~/curso_ometeotl/WRF/config/link_grib.csh .`

Se utiliza la configuración de dos dominios definida en los archivos *namelist.wps* y *namelist.input*:

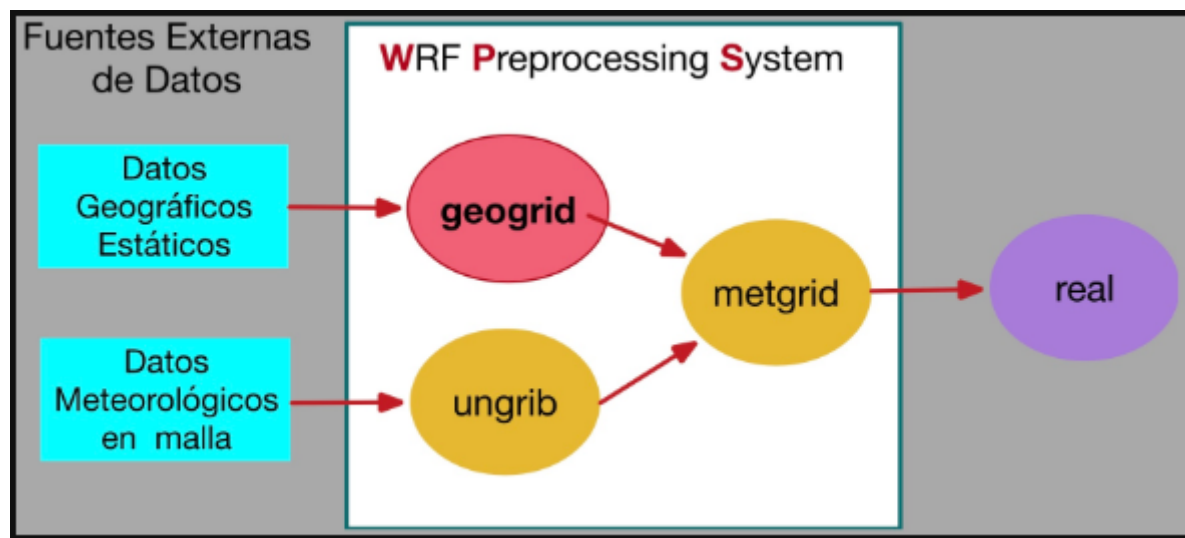
☐ Ejecutar WPS

No olvidar verificar que la fecha de `namelist.wps` sea la fecha requerida para el experimento y para sólo tres horas de ejecución en modo pronóstico para este ejemplo

En este caso se correrá el día 12 de Junio de 2022.

Verificar la configuración del dominio propuesto:

```
# Verificación de Dominios propuestos:  
cp ~/curso_ometeotl/WRF/scripts/plotgrids_new.ncl .  
ml purge  
ml load ncl/6.6.2  
ncl plotgrids_new.ncl  
# Revisar desde Jupyter la creación del archivo PDF
```



A continuación se muestra, un [ejemplo](#) de la etapa de preprocesamiento con WPS:

Running WPS

- You are now ready to begin running WPS and WRF. Start by going to the WPS directory:

```
cd WPS
```

- Make any changes to the `namelist.wps` file, to reflect information for your particular run
- Before running `geogrid`, make sure that you have your `geog_data_path` set to the location where you put your geography static data. Once that is set, you can run `geogrid`.

```
./geogrid.exe >& log.geogrid
```

- If you successfully created a `geo_em*` file for each domain, then you are ready to prepare to run `ungrib`. Start by linking in the input GFS data:

```
./link_grib.csh path_where_you_placed_GFS_files
```

Then link to the correct Vtable (GFS, for this case):

```
ln -sf ungrib/Variable_Tables/Vtable.GFS Vtable
```

Then run the `ungrib` executable:

```
./ungrib.exe
```

You should now have files with the prefix "FILE" (or if you named them something else, they should have that prefix)

- You are now ready to run `metgrid`:

```
./metgrid.exe >& log.metgrid
```

You should now have files with the prefix `met_em*` for each of the time periods for which you are running.

- Creación de script de ejecución con SLURM para **WPS-etapa geogrid**.

NOTA: No olvidar sustituir el nombre de la partición por la partición seleccionada para correr la prueba, así como otros parámetros.

```
# Archivos necesarios para ejecución de programa geogrid.exe:
```

```
# Ruta en Clúster Tlaloc de datos estáticos:  
/LUSTRE/public/entradas_wrf/datos_geograficos
```

```
# Ruta de Datos Meteorológicos Pronóstico Global GFS:  
/tmp/SeminarioENCIT/GFS
```

IMPORTANTE: Para correr la etapa de WPS en clúster `tlaloc.atmosfera.unam.mx` se utilizará la partición **golden**

```
#!/bin/bash
```

```
# script run-geogrid.sh
```

```
#SBATCH -J demo_WRF4_geogrid
#SBATCH -p id
#SBATCH -N1
#SBATCH --ntasks-per-node 1
#SBATCH -o slurm.%x.%j.out
#SBATCH -e slurm.%x.%j.err
```

```
cd $HOME/WRFV4/WPS
ml load intel/2022u2
ml load curl hdf5 jasper libaec libpng mpi netcdf-c netcdf-fortran zlib
ml load wrf/4.2.1
ml restore wrf-operativo
srun geogrid.exe
```

Después de ejecutar `geogrid.exe` se debieron haber creado los archivos `geo_em.d01.nc` y `geo_em.d02.nc` correspondientes a los dominios 1 y 2 con la configuración del Pronóstico Operativo del Grupo IOA.

Para correr el anterior `script` sólo ejecutar:
`sbatch run-geogrid.sh`

```
# Preparación ungrib (Archivos GFS* del 2022-06-12):
# Ejecutar el script:
cd ~/WRFV4/WPS
./link_grib.csh /tmp/SeminarioENCIT/GFS/gfs*
```

```
# Enseguida correr los script sbatch editando el nombre del trabajo y
# el programa correspondiente a la etapa de WPS.
```

```
# Correr ungrib.exe
SBATCH run-ungrib.sh
```

```
# Finalmente, si todo corrió exitosamente, ejecutar metgrid.exe
SBATCH run-metgrid.sh
```

Sesión 3

☐ Ejecutar WRF.

NOTA: No olvidar verificar que la fecha de `namelist.input` sea la requerida y para sólo 1 día de ejecución en modo pronóstico, según los requerimientos de la ejecución.

Para ejecutar el modelo wrf.exe es necesario vincular los archivos para la ejecución del modelo WRF, asociados a la versión del modulo de WRF 4.2.1

```
cd ../WRF
ln -s /LUSTRE/public/wrf_run_files/* .
```

Enseguida se pueden correr los scripts de sbatch `run-real.sh` y `run-wrf.sh`:

```
# Vincular los archivos met_em.d0* al directorio WRF
# creado:
```

```
cd ../WRF
ln -sf ../WPS/met_em.d0* .
```

```
### SCRIPT run-real.sh
```

```
# Script run-real.sh:
#!/bin/bash
```

```
# script run-real.sh
#SBATCH -J real_WRF4
#SBATCH -p golden
#SBATCH -N 1
#SBATCH --ntasks-per-node 24
#SBATCH -o slurm.%x.%j.out
#SBATCH -e slurm.%x.%j.err
```

```
cd $HOME/WRFV4/WRF
ml restore wrf-operativo
```

```
export CORES=24
/sbin/logsave REGISTRO_REAL.txt mpirun -np $CORES real.exe
```

```
### SCRIPT run-wrf.sh
```

```
# Script run-wrf.sh
#!/bin/bash
```

```
# script run-wrf.sh
#SBATCH -J wrf_WRF4
#SBATCH -p golden
#SBATCH -N 1
#SBATCH --ntasks-per-node 24
#SBATCH -o slurm.%x.%j.out
```

```
#SBATCH -e slurm.%x.%j.err
```

```
cd $HOME/WRFV4/WRF
```

```
ml restore wrf-operativo
```

```
export CORES=24
```

```
/sbin/logsave REGISTRO_WRF.txt mpirun -np $CORES wrf.exe
```

NOTA: Verificar el nombre de la partición, el directorio de trabajo, el número de cores y las directivas de SLURM para asignar el número de nodos y tareas por nodo, según los requerimientos y la partición donde se vaya a correr el modelo.

Una vez que ya se tienen los scripts de SLURM disponibles, ya es posible mandar a correr primero la etapa de *real.exe* y al finalizar *wrf.exe*:

Se mandan a correr los siguientes scripts:

```
sbatch run-real.sh
```

Al finalizar la ejecución del *real.exe* y SOLO SI fue exitosa la ejecución se debieron de haber creado los archivos con las condiciones de frontera y las condiciones iniciales. A esta etapa se le conoce como interpolacion vertical.

Proceder a correr el script de WRF siguiente:

```
sbatch run-wrf.sh
```

MONITOREO EJECUCIÓN DE WRF

Se pueden utilizar las siguientes instrucciones para determinar el estado de ejecución de los trabajos enviados al Clúster:

```
# Verificar el estado del trabajo en SLURM:
```

```
squeue $USER -i 5
```

```
# Verificar el estado, tiempos de escritura y avance de la ejecución:
```

```
cd $HOME/WRFV4/WRF
```

```
tail -f rsl.out.0000
```

```
# Inspeccionar en los archivos de registro qué pudo haber fallado, si es el caso:
```

```
less slurm.err.*
```


Wed Oct 23 14:16:54 2024

JOBID	PARTITION	NAME	USER	ST	TIME	NODES	NODELIST(Reason)
1164079	cigom	interact	analaura	R	48:24	1	node11
1164074	cigom	interact	gaby.res	R	2:42:23	1	node2
1164067	cigom	interact	analaura	R	3:52:01	1	node10
1164080	workq2	real_WRF	a.2035	R	0:10	3	node[31-33]

Postprocesamiento de salidas generadas en etapas WPS y WRF:

Para postprocesamiento, por ejemplo graficación de **variables**, es *recomendable utilizar uno nodo de cómputo dedicado*. Para ello, utilizar las *siguientes instrucciones*:

Iniciar *una sesión interactiva*

```
srun -p golden --pty /bin/bash
```

Verificar *asignación de nodo*:

```
squeue -u $USER # Además el prompt de la sesión de bash cambia
```

```
encit00@ometeotl:~$ srun -p id --pty /bin/bash
```

```
encit00@node17:~$ squeue -u $USER
```

JOBID	PARTITION	NAME	USER	ST	TIME	NODES	NODELIST(Reason)
1324368	id	bash	encit00	R	0:08	1	node17

```
encit00@node17:~$
```

Complementario: TMUX, SLURM, control de trabajos

- ☐ Crear sesión de trabajo en TMUX
- ☐ Salir y recuperar sesión de trabajo en TMUX

MPI

- ☐ Trabajos en ejecución en modo serial y paralelo
- ☐ Ejecución en Paralelo: *memoria compartida y memoria distribuida*

SLURM

- ☐ Formas de acceder a los recursos del Clúster: Sesión interactiva y scripts *sbatch*

Previo

- ☐ Entorno de ejecución y datos de simulación
- ☐ Ejecutar WRF en Clúster Ometeotl
- ☐ Ejecución vía `srun` y `sbatch`

Python: Bibliotecas y módulos para el estudio de variables meteorológicas y salidas de WRF:

<https://foundations.projectpythia.org/landing-page.html>

```
cd ~/curso_ometeotl/WRF/scripts
```

```
# Entornos de postprocesamiento
```

```
ml load conda
```

```
ml load ncl
```

```
conda activate wrf-python
```

```
# Scripts de python
```

```
python wrf-dominios.py
```

```
python dataset_vars.py
```

```
python precipita_zmvm.py
```

```
# Scripts NCL
```

```
ncl wrf_Precip2.ncl
```

Referencias:

- https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/wrf_tutorial/build/html/index.html
- https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/tutorial/presentation_pdfs/202307/
- https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/tutorial/presentation_pdfs/
- <https://registry.opendata.aws/noaa-gfs-bdp-pds/>
- https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/download/get_sources_wps_geog.html
- http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_v4/contents.html
- https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/OnLineTutorial/compilation_tutorial.php#STEP8
- <https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/OnLineTutorial/Basics/>
- <https://docs.nersc.gov/applications/wrf/>
- <https://hpc.llnl.gov/sites/default/files/scancel.txt>
- <https://slurm.schedmd.com/quickstart.html>
- https://lmod.readthedocs.io/en/latest/010_user.html
- <https://www.ocf.berkeley.edu/~ckuehl/tmux/>
- <https://www.hawkhost.com/blog/2010/06/28/tmux-the-terminal-multiplexer/>