

Paralelização da transformada de Legendre do Modelo de Circulação Geral Atmosférico do CPTEC usando placas aceleradoras gráficas

Carlos Renato de Souza¹, Stephan Stephany², Jairo Panetta³

¹Programa de Mestrado ou Doutorado em Computação Aplicada – CAP
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE

²Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada – LAC
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE

³Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos – CPTEC
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE

carlos.renato@cptec.inpe.br, stephan@lac.inpe.br,
jairo.panetta@cptec.inpe.br

***Abstract.** Since 1995 the CPTEC executes daily the atmospheric general circulation model (AGCM) for weather forecast. Climate forecasts require monthly executions of the same model. In the case of weather forecast, the model resolution has been continuously increased, but this implies in a significant increase of the processing time, as the model complexity is of the order of the fourth power of the inverse of the resolution. This problem has been tackled with the increase of the model degree of paralelism in order to employ more and more processors. An alternative would be the use of graphics cards in order to avoid an excessive number of processors that would be required for a further increase of resolution. This work evaluates the suitability of graphic cards to accelerate the part of the MCGA that defines its complexity: the Legendre and Fourier transform. It will investigate the speed-up and the impact on model maintenance and portability due to the use of several programming interfaces for graphics accelerator cards.*

***Resumo.** Desde 1995 o CPTEC executa diariamente o Modelo de Circulação Geral da Atmosfera (MCGA) para previsão de tempo e mensalmente, para previsão climática. A resolução desse modelo para previsão de tempo vem sendo continuamente aumentada, acarretando aumento desproporcional do tempo de processamento, pois a complexidade computacional desse modelo é da ordem da quarta potência do inverso da resolução. Esse problema vem sendo contornado pela melhoria do paralelismo do modelo, de forma a utilizar uma quantidade crescente de processadores. Alternativamente, pode-se fazer uso de placas gráficas de forma a evitar o número excessivo de processadores necessário para o próximo aumento de resolução. Este*

trabalho visa avaliar a adequação de placas gráficas para acelerar a execução do trecho do MCGA que define sua complexidade: as Transformadas de Legendre e de Fourier. Este trabalho investiga o ganho computacional e o impacto na manutenção e na portabilidade do modelo pelo uso de diversas interfaces de programação de placas aceleradoras gráficas.

Palavras-chave: *modelo de circulação geral da atmosfera, transformada de Fourier, transformada de Legendre, placas aceleradoras gráficas*

1. Introdução

O Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPTEC) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) usa atualmente o Modelo de Circulação Geral da Atmosfera (MCGA) [Bonatti 1996], como principal ferramenta para elaborar previsões de tempo, previsões de clima e quadros futuros de mudanças climáticas.

Os modelos meteorológicos para a previsão de tempo e de clima são conhecidos por demandarem vastos recursos computacionais. O volume de recursos cresce não linearmente com o aumento da resolução espacial. A necessidade do aumento da resolução espacial advém do desejo de gerar previsões cada vez mais precisas. Porém, para tanto, os custos computacionais de um ambiente computacional podem se tornar astronômicos.

O MCGA é um modelo global espectral numérico de previsão atmosférica. Desde o início do uso operacional do MCGA no CPTEC/INPE [Cavalcanti 1996], ele é utilizado como principal ferramenta para elaborar previsões de tempo e clima. Para clima usa-se a configuração T062L28, ou seja, truncamento de 62 ondas na coordenada horizontal e 28 níveis na vertical. Tal configuração representa os campos atmosféricos em grade regular com 192 pontos longitudinais e 96 pontos latitudinais, resultando em resolução de aproximadamente 200 km x 200 km, ou seja, aproximadamente dois graus de latitude por dois graus de longitude. Essa resolução ainda é utilizada hoje para as previsões climáticas, sendo executado um conjunto de 15 rodadas simultâneas uma vez ao mês, constituindo a chamada previsão por conjunto.

A complexidade computacional do MCGA é $O(n^4)$, onde n representa o número de ondas (relacionado ao inverso da resolução). Entretanto, o aumento da resolução do modelo acarreta aumento não linear no seu custo computacional, pois aparecem trechos críticos no modelo que passam a dominar seu tempo de execução. Estes trechos, que não dominavam com resoluções menores, são os módulos das transformadas de Fourier e de Legendre que chegam a ocupar cerca de 80% das operações em ponto flutuante realizadas em um ciclo de previsão [PANETTA 2006].

Nos últimos anos a indústria de processadores vêm enfrentando dificuldades em manter o aumento progressivo de desempenho dos processadores comum às últimas décadas. Isso ocorre por conta da saturação na exploração dos recursos físicos (consumo de energia e a dissipação térmica) dos componentes do processador atual. Esses são problemas que se tornaram frequentes na computação paralela de alto.

Uma solução para atender às grandes demandas de processamento atuais encontra-se na utilização de processadores de placas gráficas para processamento em geral (GPGPUs – *General Purpose Graphics Processing Units*).

As GPUs são tradicionalmente utilizadas para processar gráficos para jogos tanto em

microcomputadores pessoais quanto em vídeo-games especializados. As GPUs possuem baixo custo face ao seu poder de processamento se comparado a CPUs tradicionais, o que motivou seu uso para outras finalidades que não o processamento gráfico.

A proposta desse trabalho é implementar o trecho do MCGA de maior carga computacional, correspondente às transformadas de Fourier e Legendre, em GPU, explorando as interfaces de programação disponíveis atualmente para essas placas aceleradoras, e apresentar um estudo dos possíveis ganhos de desempenho, além das vantagens e desvantagens de cada interface de programação utilizada.

2. Modelo Meteorológico

O MCGA é um modelo global espectral hidrostático, escrito em Fortran 90 com alocação dinâmica de memória integral, com aproximadamente 65.000 linhas de código [PANETTA 2006], baseado em leis físicas que governam os movimentos atmosféricos. A paralelização é feita pela decomposição de domínio (MPI 1.1 para divisão do domínio entre nós distintos, e OpenMP 2.0 para subdivisão do domínio dentro de cada nó de memória compartilhada).

As equações do modelo são escritas na forma espectral, e são resolvidas por métodos numéricos, sendo necessário discretizá-las nas quatro dimensões (x: longitude, y: latitude, z: altitude, t: tempo). As variações espaciais nas dimensões x e y são representadas por coeficientes adequados para expressar movimentos de fluidos numa geometria esférica (harmônicos esféricos), composto por série de Fourier na direção oeste-leste (longitudinais) e de Transformadas de Legendre na direção norte-sul (latitudinais). Essa representação numérica permite o cálculo analítico das derivadas nas duas direções com um erro de truncamento e de arredondamento embutido mínimo.

O modelo foi dividido em três principais partes: Física, Dinâmica e as Transformadas. Dessa forma, podemos identificar facilmente qual a parte do MCGA que demanda mais recursos computacionais nas várias resoluções executadas. Panetta (2006) verificou que o cálculo das transformadas ocupa grande parte das operações matemáticas executadas pelo MCGA, como mostra a Tabela 1.

Tabela 1 – Número de operações em ponto flutuante (em Tflop e em porcentagem do total) executadas pelas três partes principais do MCGA para um dia de previsão para resoluções espaciais diferentes.

Partes	25km		20km		15km		10km	
Transf.	249	60%	591	66%	1846	73%	7576	81%
Dinam.	53	13%	104	12%	252	10%	734	8%
Física	116	28%	200	22%	422	17%	1055	11%
Total	418		895		2520		9364	

No MCGA a aplicação da Transformada de Legendre permite que uma função originalmente expressa numa dimensão espacial seja expressa por coeficientes espectrais. E analogamente para a transformada de Fourier. Define-se uma grade que

representa pontos da atmosfera (discretização) como o conjunto dos pontos $(\lambda, \varphi, \sigma)$ onde λ representa longitude, φ representa latitude e σ representa a coordenada vertical. Qualquer campo meteorológico é representado nessa grade por $G(\lambda, \varphi, \sigma)$.

Assumimos que qualquer campo meteorológico também possui uma única representação em série de Fourier, definida por:

$$G(\lambda, \varphi, \sigma) = \sum_{m=-T_\varphi}^{T_\varphi} G^m(\varphi, \sigma) e^{im\lambda} \quad (1)$$

O conjunto de coeficientes $G^m(\varphi, \sigma)$ define a representação da função no espaço de Fourier, onde m é a notação do número de ondas de Fourier.

Para cada representação espacial de Fourier (ou seja, para cada onda de Fourier m), assumimos que existe uma única representação espectral em Polinômios de Legendre, definida por:

$$G^m(\varphi, \sigma) = \sum_{n=|m|}^T G_n^m(\sigma) P_n^m(\text{sen } \varphi) \quad (2)$$

Onde $G_n^m(\sigma)$ é a representação espacial do campo espectral de ordem m (número de ondas da série de Fourier) e de grau n (número de ondas da Transformada de Legendre). E $P_n^m(\text{sen } \varphi)$ são as funções polinomiais de Legendre de ordem m e grau n computadas em $\text{sen}(\varphi)$. Maiores detalhes dessas representações podem ser encontradas em Panetta, 2001.

Em suma, transformou-se um campo tridimensional em ponto de grade que pode ser representado por uma função real $G(\lambda, \varphi, \sigma)$ (em função de latitude, longitude e altitude, respectivamente), em uma outra função $F(m, n, \sigma)$ dependente de m (número de ondas de Fourier), n (número de ondas de Legendre) e σ (altitude em grade discreta). O esquema a seguir ilustra a engrenagem de aplicação das transformadas.

$$G(\lambda, \varphi, \sigma) \left\{ \begin{array}{l} \lambda \xrightarrow{FFT} m \longrightarrow m \\ \varphi \longrightarrow \varphi \xrightarrow{Legendre} n \\ \sigma \longrightarrow \sigma \longrightarrow \sigma \end{array} \right\} F(m, n, \sigma)$$

A Figura 1 ilustra as sucessiva aplicação das transformadas de Fourier e de Legendre, esta última para cada onda de Fourier, bem como as correspondentes transformadas inversas. Essa transformação da representação de pontos de grade para coeficientes espectrais e vice-versa é calculada a cada passo de tempo de integração do MCGA. Isso explica o elevado custo computacional dessas transformadas na execução do MCGA

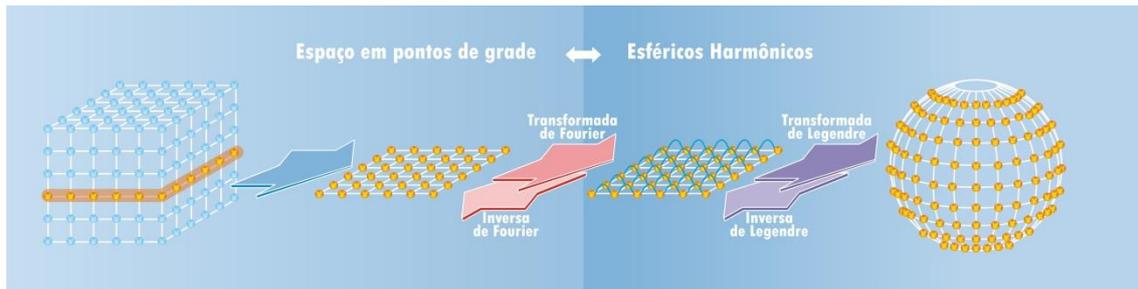


Figura 1. - Aplicação das transformadas de Fourier e de Legendre e suas inversas no MCGA.

3. Paralelização utilizando GPUs

Há poucos anos atrás surgiu a ideia de utilizar placas gráficas para processamento paralelo matemático-aritmético. Assim que os fabricantes perceberam o potencial desse mercado, começaram a desenvolver placas mais potentes, com uma arquitetura voltada para atender tanto o público dos jogos com gráficos mais potentes quanto um público diferente que começava a aplicar GPUs em programação paralela com propósitos não-gráficos.

Enquanto a melhoria de desempenho de microprocessadores de uso geral diminuiu de forma significativa, as GPUs têm continuado a melhorar continuamente. A partir de 2008, a proporção do cálculo de pico de ponto flutuante entre multicores GPUs e multicores CPUs é de cerca de 10 para 1. A Figura 2 mostra esse fenômeno.

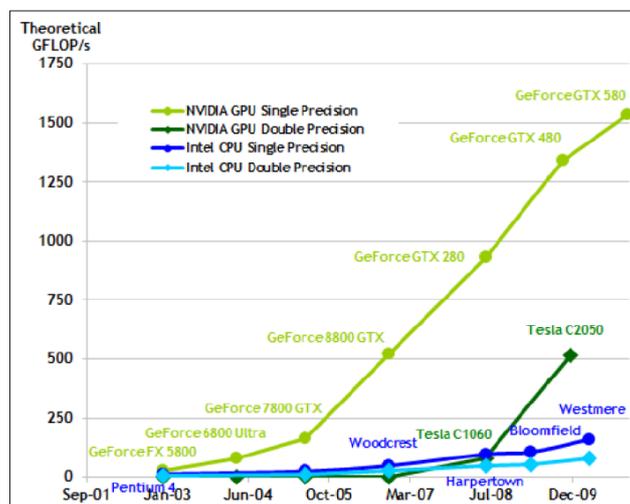


Figura 2: Performance GPU x CPU expressa em TFlops. Fonte: NVIDIA, 2011.

Enquanto CPUs dedicam grande parte de seus circuitos ao controle, as GPUs focam mais em ALUs (*Arithmetic Logic Units*), o que as tonam mais eficientes quando executam um programa paralelo. A possibilidade de programar uma GPU atraiu programadores interessados em processamento genérico de alto desempenho.

As GPUs são estruturadas em unidades chamadas multiprocessadores. Cada

multiprocessador possui múltiplos núcleos que executam instruções segundo o modelo SIMD (*Single Instruction, Multiple Data*), ou seja, a mesma instrução é executada concorrentemente em dados diferentes. Uma variação desse modelo é aplicada às GPUs modernas, chamada de SIMT (*Single Instruction, Multiple Threads*), o que significa que uma única instrução é executada por diferentes *threads*, as quais compõem um conjunto chamado *warp* (número máximo de *threads* que podem ser executadas simultaneamente num multiprocessador da GPU, tipicamente 32). Um esquema geral da arquitetura das GPUs pode ser visto na Figura 3, onde cada linha representa um multiprocessador com seus núcleos, cada qual com sua memória cache própria. O conjunto de instruções inclui operações com inteiros, de endereçamento e de ponto flutuante de 32 e 64-bits (precisão simples e dupla, respectivamente), além de instruções para acesso à memória para leitura e escrita.

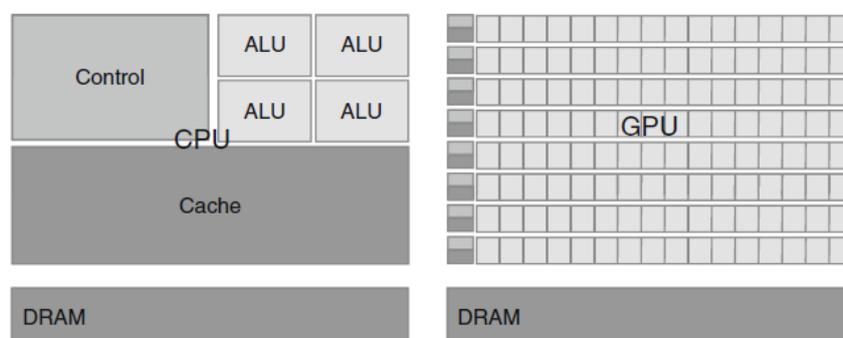


Figura 3: Arquitetura GPU x CPU. Fonte: Kirk, 2009.

A rápida evolução das placas gráficas levou a seu uso crescente em processamento de alto desempenho. Essa tendência mundial pode ser observada na lista dos 10 computadores mais rápidos do mundo, dentre os 500 listados no site www.top500.org em novembro de 2011. Importante ressaltar que os computadores nas posições 2, 4, 5 e 10 possuem arquiteturas híbridas, no caso com placas aceleradoras gráficas, apresentando consumo de energia abaixo dos demais.

4. Metodologia

A primeira etapa do trabalho consiste em estudar os códigos do MCGA que serão paralelizados em GPU. Conhecer bem esses códigos é fundamental para que se possa extrair o máximo desempenho da paralelização. É importante destacar que esses códigos estão paralelizados com chamadas a rotinas da biblioteca de comunicação por troca de mensagens MPI.

O trecho do MCGA que faz a conversão dos campos atmosféricos tridimensionais de ponto de grade para coeficientes espectrais é composto por quatorze códigos fontes, escritos todos em Fortran 90. Alguns desses códigos foram adaptados para serem executados separadamente do restante do modelo global.

Os códigos estão organizados de forma que um programa gerencia a execução do MCGA fazendo chamadas a funções e sub-rotinas num esquema hierarquizado que

inclui as inicializações de parâmetros do modelo e de funções básicas do MPI, com alocação dinâmica de memória para todos os dados atmosféricos.

Há um programa específico para mapear a dimensão da grade espacial para a grade das coordenadas esféricas. Assim, um número discreto de longitudes, latitudes a latitudes é mapeado para um número discreto de ondas de Fourier, ondas de Legendre e altitudes, respectivamente. Dessa forma, cada onda de Fourier corresponde a uma latitude. A aplicação das duas transformadas, Fourier e Legendre gera uma matriz multidimensional, na qual são armazenados, para cada ponto da grade de coordenadas esféricas, os pares de coeficientes espectrais reais e imaginários (Fourier e Legendre) para cada nível na vertical, ou seja, para cada altitude. Uma vez que há menos pontos em latitudes maiores, existe um esquema que empacota várias latitudes numa mesma dimensão da matriz.

Após a aplicação das transformadas de Fourier e Legendre e dos cálculos feitos no domínio das coordenadas esféricas, são aplicadas as transformadas inversas, voltando-se ao domínio espacial.

Um primeiro passo é a análise dos programas do MCGA que executam essas transformações diretas e inversas de forma a identificar quais transformadas continuariam paralelizadas com uso da biblioteca MPI e quais poderiam ser efetuadas com o uso de placas gráficas. Uma análise preliminar mostra que as transformadas de Legendre e sua inversa poderiam ser executadas nessas placas. Entretanto, os códigos do MCGA são complexos e as placas gráficas têm limitações relativas ao tamanho de suas memórias locais e da latência relativa à transferência entre a memória principal e a memória da placa e vice-versa. Torna-se necessário analisar o perfil de tempos de execução (*profiling*) do MCGA para identificar a conveniência de migrar um ou outro trecho (por exemplo, relativo à transformada de Legendre) da execução em múltiplas cores de CPUs para a execução em placas gráficas.

5. Conclusões

Há uma forte tendência de se empregar GPUs em supercomputadores. Nessa linha, uma vez que possivelmente o CPTEC terá um supercomputador provido de GPUs, o presente trabalho visa avaliar a viabilidade de se paralelizar, para execução em GPU, trechos críticos do principal modelo numérico do CPTEC, o MCGA, correspondentes às transformadas de Fourier e Legendre.

Referências

- Bonatti, J. P. (1996), Modelo de circulação geral atmosférico do CPTEC. Climanálise Especial 1996, edição comemorativa de 10 anos. Disponível em: <http://climanalise.cptec.inpe.br/~rclimanl/boletim/cliesp10a/bonatti.html>. Acesso em janeiro de 2012.
- Cavalcanti, I. F. A. (1996), Previsão climática no CPTEC. Climanálise Especial 1996, edição comemorativa de 10 anos. Disponível em: <http://climanalise.cptec.inpe.br/~rclimanl/boletim/cliesp10a/precli.html>. Acesso em janeiro de 2012
- Panetta, J., Barros, S. R. M., Bonatti, J.P., Tomita, S. S., Kubota, P. Y. (2006),

Computational Cost of CPTEC AGCM. Publicação interna CPTEC/INPE. 2006.

Panetta, J. (2001), Mathematical Aspects of Transforms. Draft Documentation for Software Version 0.

Kirk, D. B., Hwu, W. W. Programming Massively Parallel Processors. A hands-on approach. Elsevier Inc.

Miranda, C. S.(2011), A evolução da GPGPU: arquitetura e programação. Departamento de Projeto Mecânico, Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP.