



Accélération de codes

J. Vidot - CNRM

P. Chervet - ONERA

Les problèmes de transfert radiatif atmosphérique

Milieu atmosphérique complexe

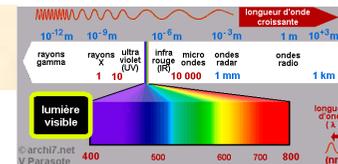


Multiples composants (gaz, aérosols, nuages...)
 Milieu tridimensionnel
 Fortes hétérogénéités 3D

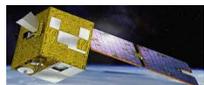
Equation de propagation de rayonnement complexe (1D,2D,3D)

$$\frac{dL_o(p, \omega)}{dt} = \underbrace{-\sigma_a L_i(p, \omega)}_{\text{Absorption}} - \underbrace{\sigma_s L_i(p, \omega)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{L_e(p, \omega)}_{\text{Emission}} + \underbrace{\sigma_s \int_{\Omega} p(\omega_i \rightarrow \omega) L_i(p, \omega_i) d\omega_i}_{\text{Gain Diffusion}}$$

Différents domaines spectraux d'étude

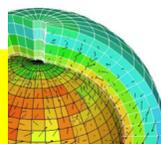


Traitement de données mesurées / calculées (gros volumes)

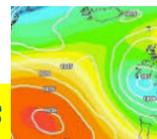


Observations

Assimilations
de données



Inversions

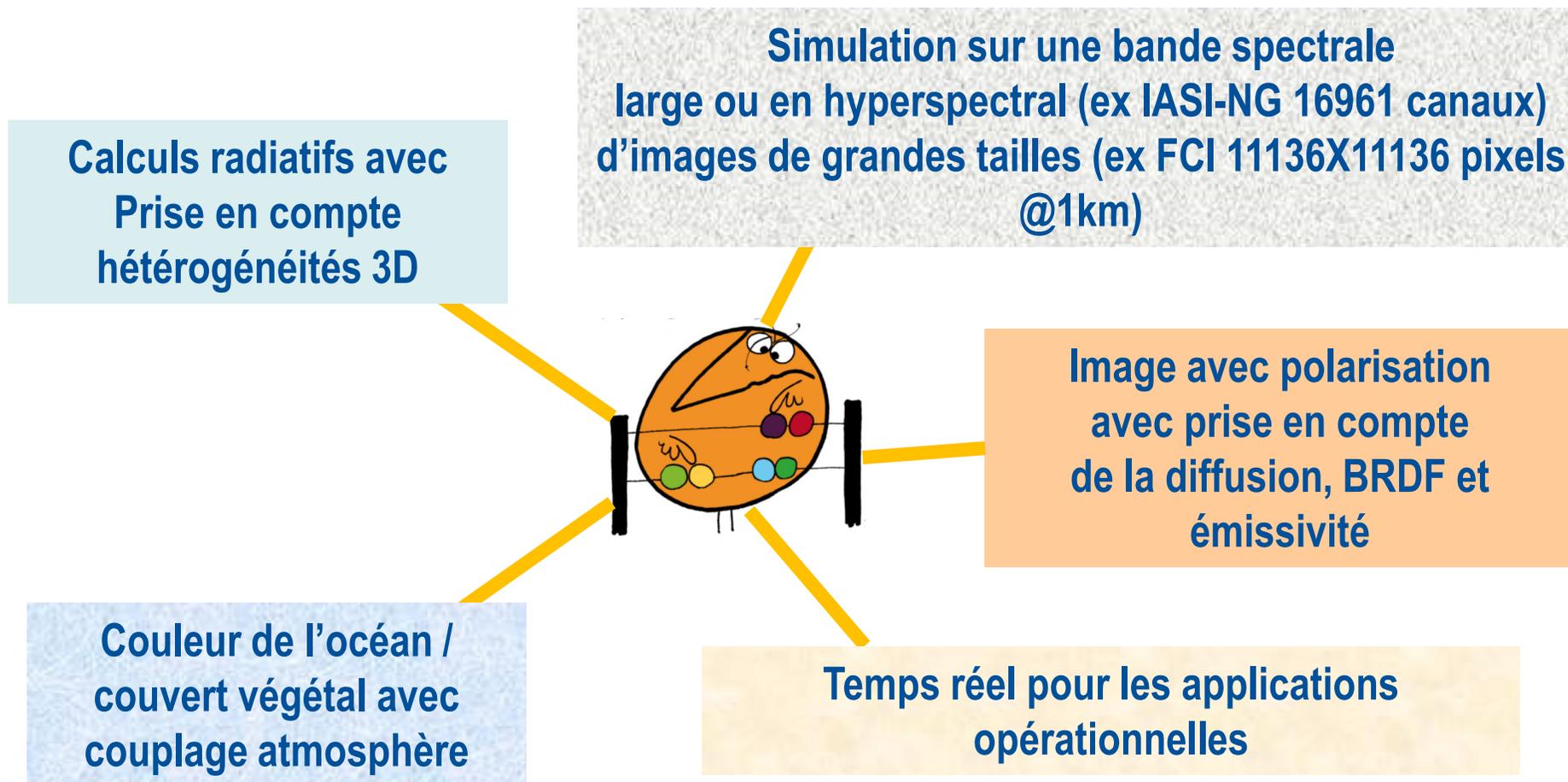


Générations
Images / performances

Qui utilise ?



Qui a des problèmes de vitesse d'exécution ?



Les problèmes de transfert radiatif atmosphérique

Traitement gros volumes de données

Méthodes résolution mathématique
Précisions des résultats



Besoins de codes rapides

Méthode d'accélération



Utilisateurs

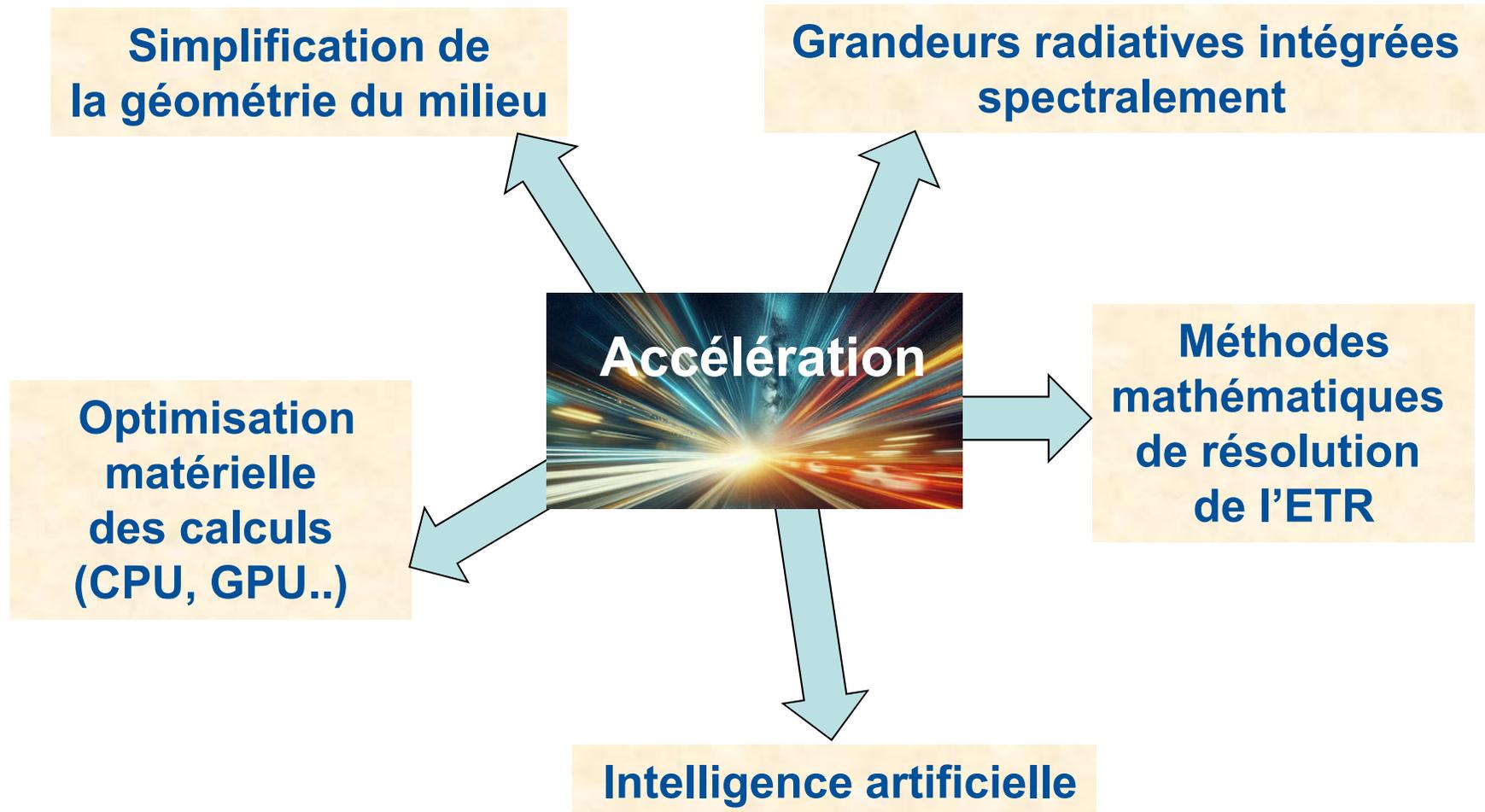


Développeurs



Compromis Précision/Besoin/Temps de calculs

Comment accélérer en transfert radiatif ?



Quelle(s) solution(s) d'accélération ?

Exemple de situation de calculs de transfert radiatif



Scène nuageuse complexe

Présence de source naturelle ?

Besoins

Types grandeurs radiatives

Nombre de grandeurs

Précisions

Calculs directs ? Inversion ?

Observations par Capteur
résolutions spatiale,
Positions variables,
domaine spectral...



Aspect chronophage
Quels moyens d'accélérer
Les temps de calculs

Exemple de Cas



Applications climatiques météorologiques

Echelle planète
Assimiler les luminances spectrales mesurées par les instruments à bord de satellites météorologiques
(1 milliard/mois ARPEGE)
Simuler rapidement ce nombre important d'observations

Calculs directs de référence



Monté Carlo /SHDOM

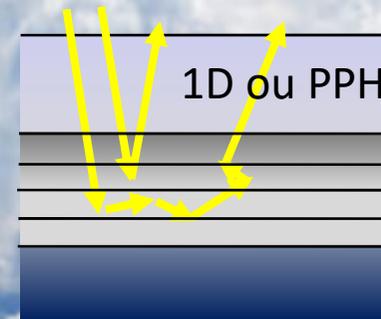
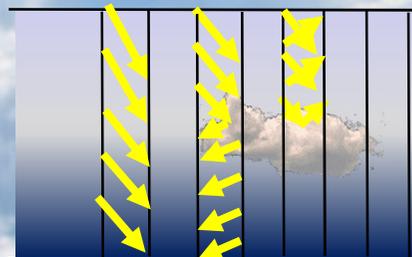
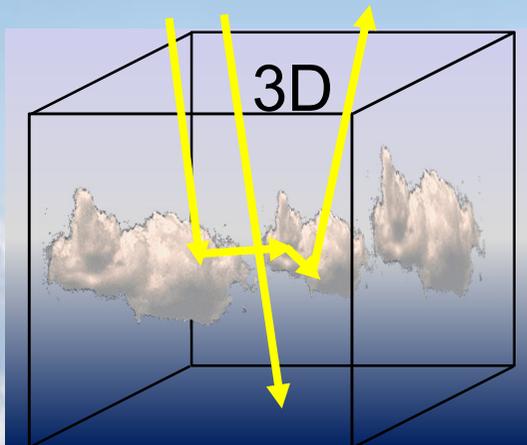


Milieu grille 3D
Interactions entre cellules
Ombrages/ brillance/ bords de nuages
Possibilités fines échelles spatiales
Limitations des grandeurs radiatives

Téledétection

Traitement de grandes zones
Multiplés mesures (hyperspectral)
Multiplés combinaisons spectrales pour détermination paramètres physiques
Traitement IASI inversion journalière de 10^6 spectres comprenant chacun 8000 canaux

La simplification du milieu – Accélération par diminution nombre de cas de calculs



La simplification du milieu – Accélération par diminution nombre de cas de calculs



**Méthodes
Plans parallèles
1 milieu équivalent**



*Hétérogénéité verticale
Moyenne horizontale
Grande échelle spatiale*



Disort / Modtran/Matisse

**Méthodes
Pseudo-3D**



*Séparation du milieu
en N colonnes
Pseudo-interactions
Pb ombrage,
bords de nuages ...*

Limitation échelles spatiales 1 km

Méthode mathématiques de résolution de l'ETR

Accélération par méthodes mathématiques

Handwritten mathematical notes and diagrams on a blackboard background, covering various physics and mathematics topics:

- Wave Functions:** $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{K}}(Ae^{-ikx} + Ae^{ikx})$ for $x < 0$, $G_n = R_n - \frac{1}{2}R_{gn} = \frac{8\pi G}{c^3} T_{nn}$, $K = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $S_B = \frac{k_B 4\pi G}{hc} M K$, $D = \frac{24\pi^2 \epsilon^2}{T^2 c^2 (1-c^2)}$
- Mechanics:** $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, $P_m - \frac{1}{2}R_{gn} + \Lambda_{gn} = \frac{8\pi G}{c^3} T_{nn}$, $H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$, $\vec{r} = \frac{D}{2\pi} + \frac{4\pi}{g^2} \vec{y}$, $r = \frac{D}{2\pi} + \frac{4\pi}{g^2} \vec{y}$
- Geometry and Trigonometry:** $\int \frac{dy}{\sqrt{a^2 - y^2}} = \arcsin(\frac{y}{a})$, $\int \frac{dy}{\sqrt{y^2 + a^2}} = \ln|\frac{y}{a} + \sqrt{1 + \frac{y^2}{a^2}}|$, $\int \frac{dy}{\sqrt{y^2 - a^2}} = \ln|\frac{y}{a} + \sqrt{1 - \frac{y^2}{a^2}}|$
- Calculus:** $I = \int e^{-ax} \cos bx dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}}$, $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle$, $S = \frac{1}{2k} \int R \sqrt{-g} d^4x$, $S = \frac{c^3 K A}{4hG}$, $D = \frac{24\pi^2 \epsilon^2}{T^2 c^2 (1-c^2)}$
- Diagrams:**
 - A sine wave with amplitude Δx .
 - A 3D coordinate system with axes x, y, z and a vector \vec{r} .
 - A 2D coordinate system with axes x, y and a curve.
 - A circular diagram with radius a and angle θ .
 - A 3D cube with vertices M, N, P and a vector \vec{r} .
- Other Equations:** $E = mce$, $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$, $S = \frac{c^3 K A}{4hG}$, $\vec{r}(t) = \vec{r}(t_0) + \vec{v}(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}\vec{a}(t - t_0)^2$, $\vec{v}(t) = \vec{v}(t_0) + \vec{a}(t - t_0)$, $\vec{r} = \frac{D}{2\pi} + \frac{4\pi}{g^2} \vec{y}$

Méthode mathématiques de résolution de l'ETR

Accélération par méthodes mathématiques

Fluctuations 3D des nuages

*résolues
spatialement*

▪ Techniques de l' IPA

TIPA (Várnai and Davies, 1999), IPAMS (Gabriel and Evans, 1996); NIPA (Marshak et al., 1998) ; NTIPA/PaNTICA (Wissmeier et al., 2013), 3dbNIPA (Zuidema and Evans, 1998) ; PGLQ (Barker and Li, 2019)

▪ Approches formelles

Théorie de la diffusion (Pomraning, 1986); TenStream (Jakub and Meyer, 2015, 2016, 2017)

▪ Méthodes hybrides

Réseaux de neurones (Faure et al., 2001; Cornet et al., 2004); approche de Fauchez et al. (2017) ; NCA (Klinger et al., 2016, 2019), MATISSE (2013)

*non résolues
spatialement*

▪ Techniques de l'IPA

Gamma IPA (Barker et al., 1996); McIPA (Pincus et al., 2003); QGIPA (Barker, 2018)

▪ L'homogénéisation

ETA (Cahalan et al., 1994) ; EHCA (Szczap et al., 2000); Renormalisation (Cairns et al., 2000); cloudlet (Petty, 2002)

▪ TR stochastique

Avaste and Vainikko (1974); Titov (1990); Stephen (1988); Kassianov et al. (2003); Davis and Xu (2015); Doicu et al. (2014, 2015)

▪ Méthodes hybrides

ecRad + SPARTACUS (Schaffer et al., 2016; Hogan et al., 2016, 2018, 2019); MC+McIPA+nuages stochastiques (Barker et al., 2016)

Méthode mathématiques de résolution de l'ETR

Accélération par méthodes mathématiques

ETR : Méthode des ordonnées discrètes avec matrice exponentielle et la modification aux petits angles Dmitry Efremenko et al. JQSRT (2013)



Traitement
Modèle direct



DOM
Petits angles (SAM)

Le champ de luminance est mis sous forme de matrices symétriques

Décomposition des matrices sous la forme de matrice de valeurs propres

Résolution de l'ETR (DOM)

Nakajima & Tanaka

Ajout point quadrature spécifique ligne de visée

« False discrete ordinate »

Modification aux petits angles (SAM)
Luminances séparées en forme isotrope et anisotrope

Solution de ETR avec SAA est soustraite de la radiance totale DOM

méthode appropriée pour modéliser la diffusion fortement anisotrope.

Limitation des expansions Legendre
Indicatrice de diffusion qu'aux couches nuageuses

« Telescoping technique »

Calculs nuage puis autres niveaux manière récursive

Méthode mathématiques de résolution de l'ETR

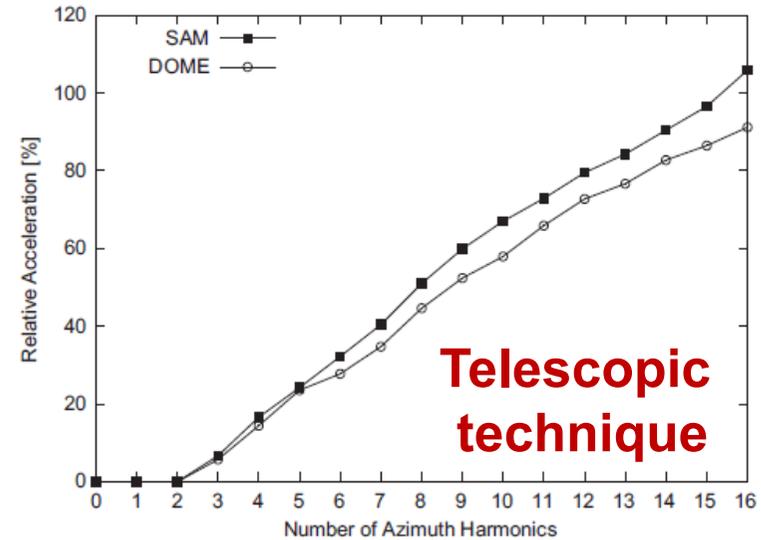
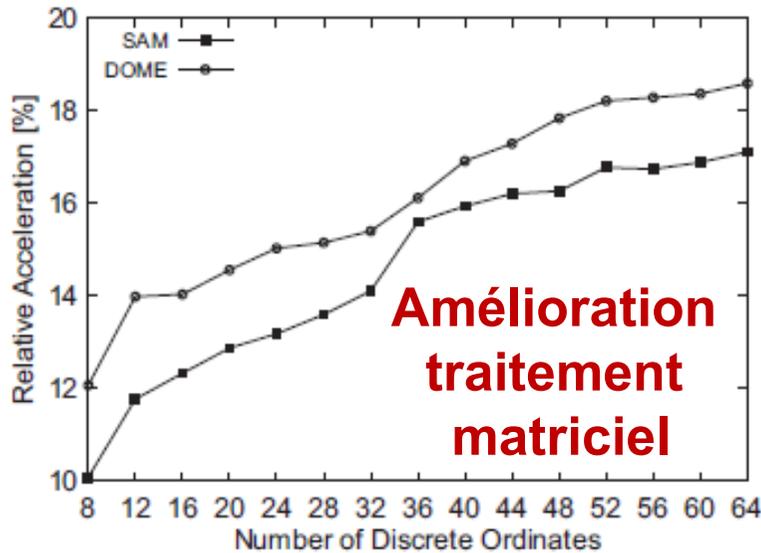
Accélération par méthodes mathématiques



DOM : opérateur matriciel / Delta M

SAM : opérateur matriciel / Small Angle

Attention SAM plus long que DOM car calculs des fonctions sources plus importants



**Accélération
False DOM** Qq %

Dmitry Efremenko et al. JQSR (2013)

GAIN

15% and 30%

Méthode mathématiques de résolution de l'ETR

Accélération par méthodes mathématiques

Composantes principales

Variables liées entre elles
« corrélées »

TRANSFORMATION

Nouvelles variables
décorrélées les unes
des autres

Avantages

résumer l'information en réduisant le nombre de variables

• HT-FRTC

 Met Office

• Havemann-Taylor Fast Radiative Transfer Code

The Havemann-Taylor Fast Radiative Transfer Code (HT-FRTC): A multipurpose code based on principal components, JQSRT,2018.
Stephan Havemann *, Jean-Claude Thelen , Jonathan P. Taylor , R. Chawn Harlow

Apprentissage calculs Raie par Raie
sur différentes conditions atmosphériques

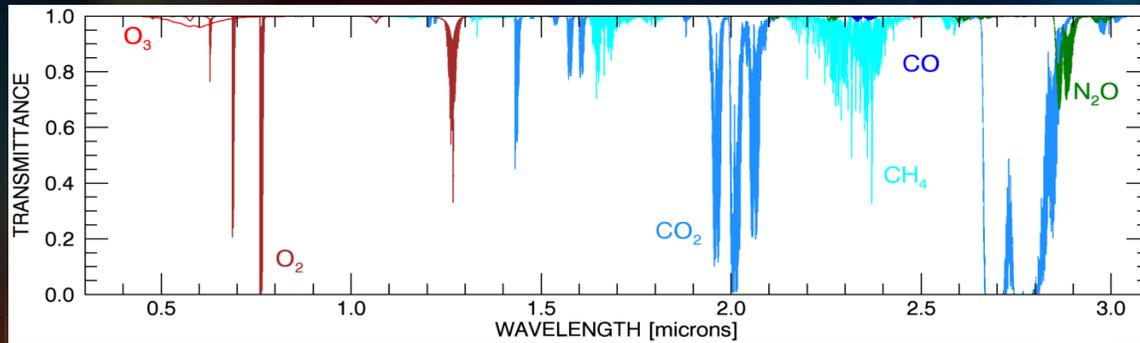
Indépendant du
capteur

Calculs luminances /transmissions

NEON

Accélération des calculs hyperspectraux
(ultraviolet → micro ondes)

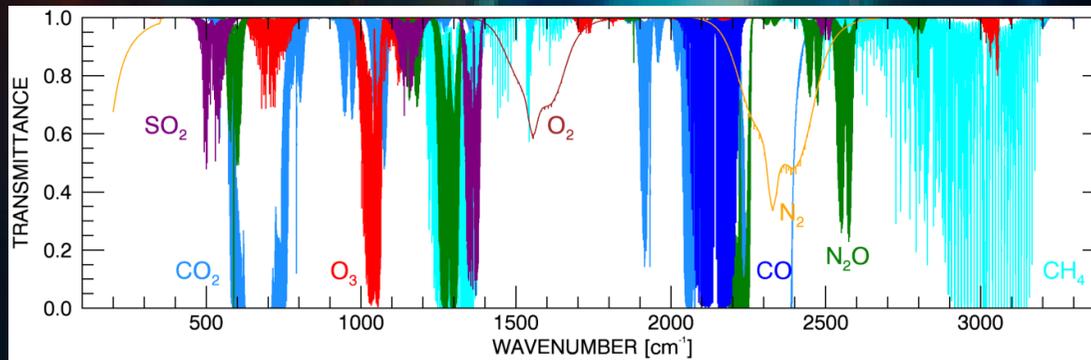
Optimisation des calculs d'absorption moléculaire



Solaire (sans H₂O)

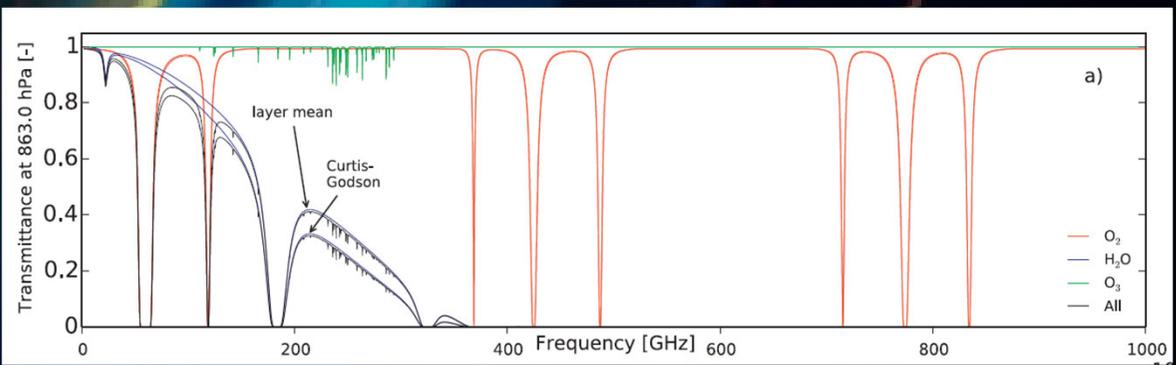
Infrarouge

Infrarouge
(sans H₂O)



Micro-ondes
Sub-millimétriques
(Turner et al., 2019)

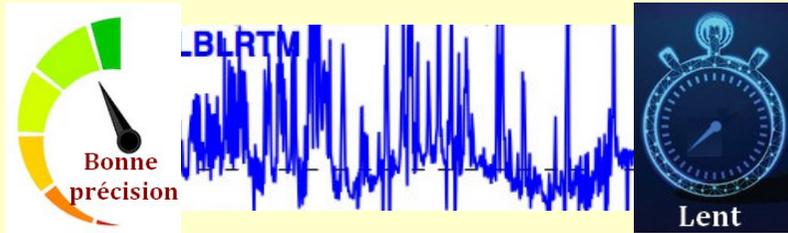
Page 17



Optimisation des calculs d'absorption

Accélération par utilisation de distribution

Modèle Raie par Raie



Modèle de bande



2 ordres de grandeurs

k-distribution

ecCKD: Hogan and Matricardi, 2022

<https://github.com/ecmwf-ifs/ecckd>

k-bin : Madenach et al., 2024

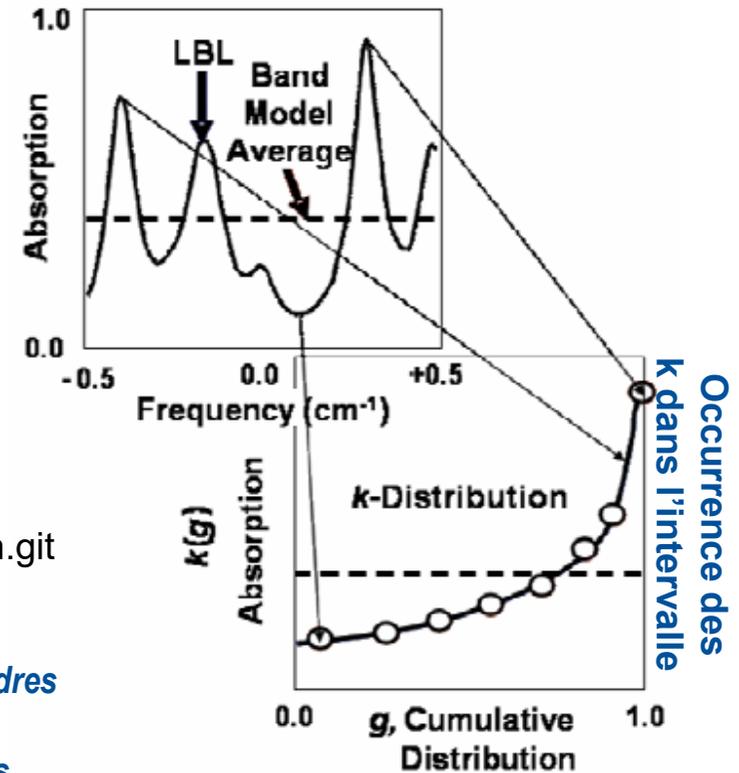
<https://gitlab.com/rene.preusker/kbin.git>

l-distribution

André, 2016



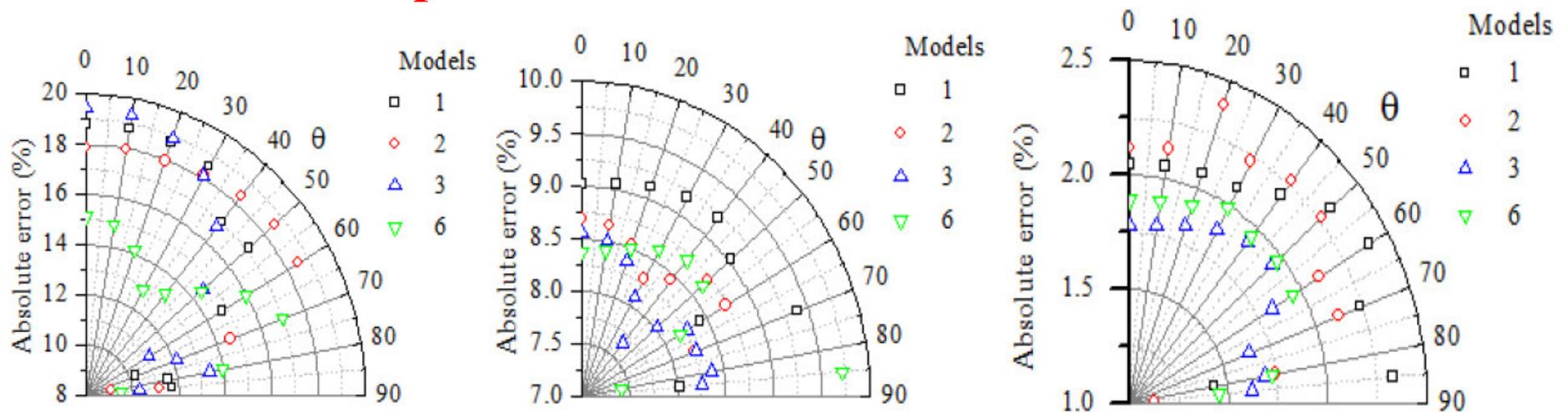
Gain plusieurs ordres de grandeurs en nombre de calculs



Optimisation des calculs d'absorption

Accélération par utilisation de distribution

Comparaison de la précision des méthodes par rapport au raie-par-raie sur la bande 2000-2500 cm^{-1}



CK corrélé
16 quadratures de Gauss

12-20 %

CK corrélé
32 quadratures de Gauss

7-9 %

L Distribution

2-2.5 %

R. Tapimo, L. Croize and F. André, "Fast and accurate infrared radiative transfer calculation method in gaseous atmospheres," Proc. IEEE IGARSS, 6993-6997 (2024)

L Distribution Modifiée < 2 %

Article en cours R. Tapimo,
L. Croize, F. André, J. Pierro (2025)

Optimisation des calculs d'absorption

Accélération par utilisation de paramétrisation

Paramétrisation des épaisseurs optiques de couche



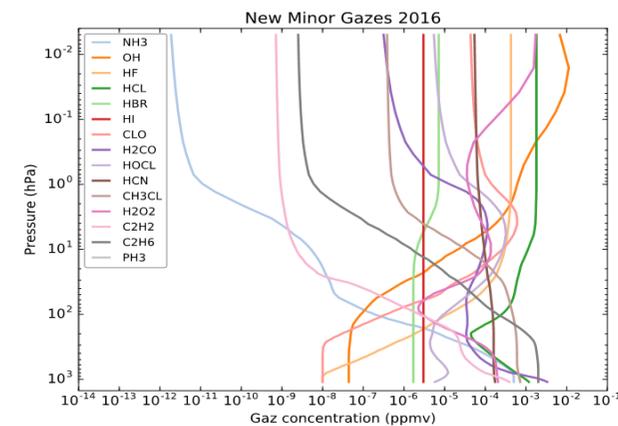
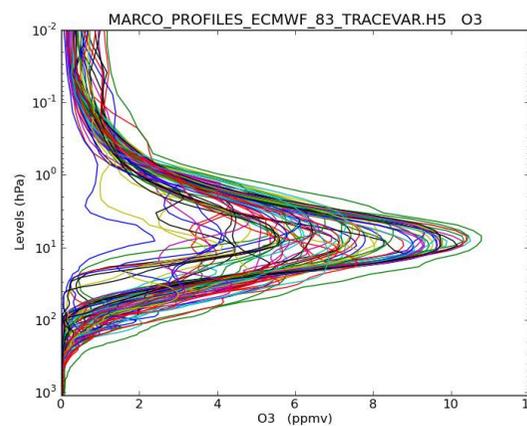
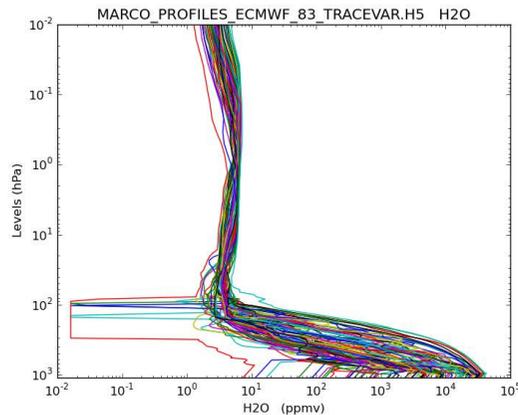
RTTOV-13 (Hocking et al., 2021)

$$\tau_{abs,i,j} = \tau_{abs,i,j-1} + \sum_{k=1}^K a_{i,j,k} X_{i,k}$$

$$\tau_j^{total} = \tau_j^{mixed} \cdot \tau_j^{wv} \cdot \tau_j^{o3} \cdot \tau_j^c, \text{ for } j = 1, n$$

Predictor	Mixed gases	Water vapour lines	Water vapour continuum
1	$\sec(\theta)$	$(\sec(\theta)W_r)^2$	$\sec(\theta)W_r^2/T_r$
2	$\sec^2(\theta)$	$\sec(\theta)W_w$	$\sec(\theta)W_r/T_r$
3	$\sec(\theta)T_r$	$(\sec(\theta)W_w)^2$	$\sec(\theta)W_r^2/T_r^4$
4	$\sec(\theta)T_r^2$	$\sec(\theta)W_r\delta T$	$\sec(\theta)W_r/T_r^2$
5	T_r	$\sqrt{\sec(\theta)W_r}$	-
6	T_r^2	$\sqrt[4]{\sec(\theta)W_r}$	-
7	$\sec(\theta)T_w$	$\sec(\theta)W_r$	-

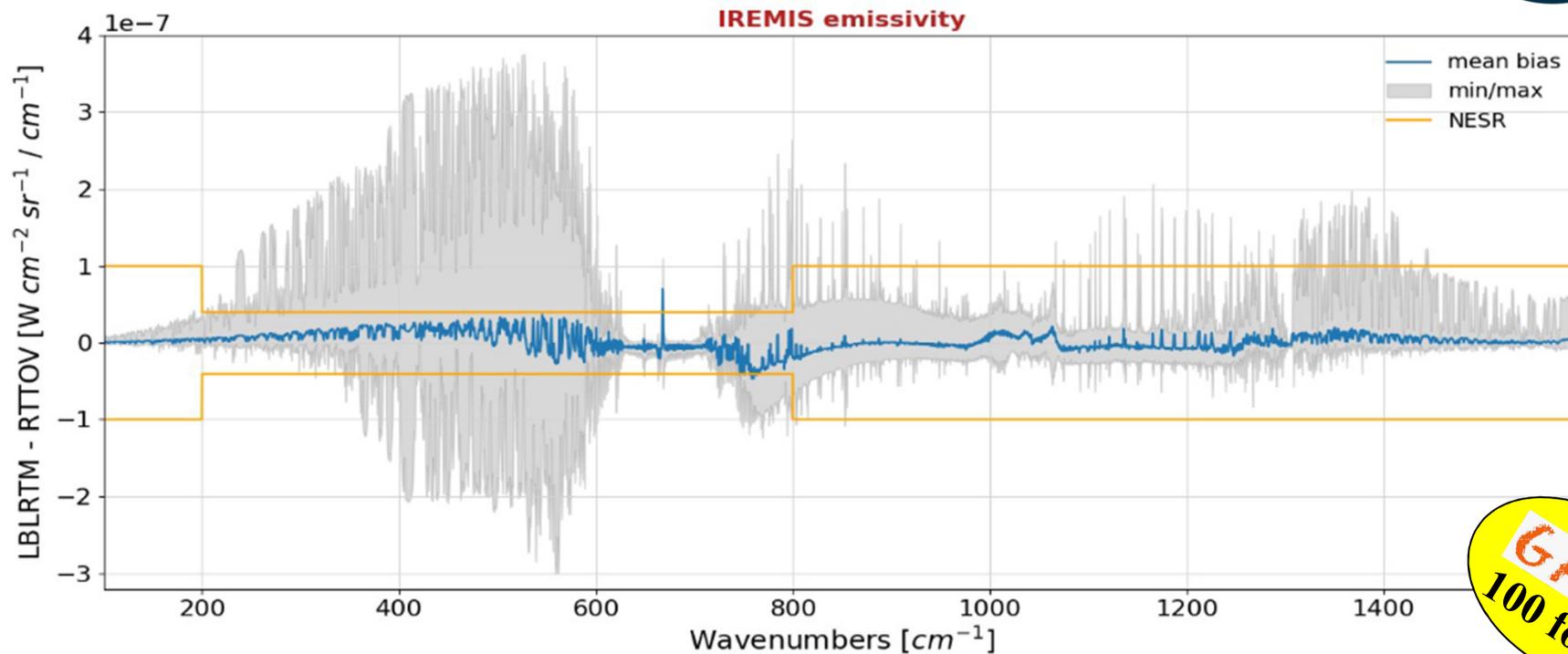
83 profils d'entraînement:



Optimisation des calculs d'absorption

Accélération par utilisation de paramétrisation

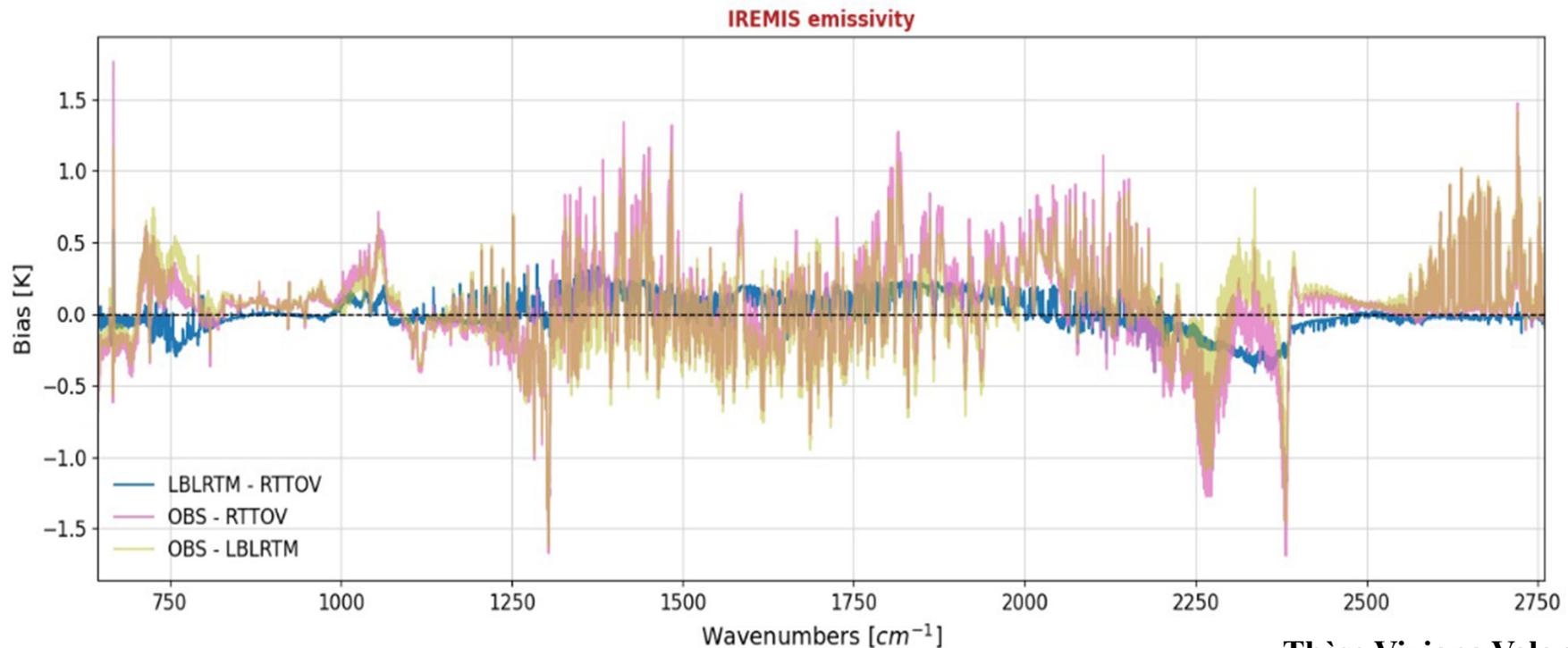
Comparaison de la précision par rapport au raie-par-raie avec la base ARSA



GAIN
100 fois

Optimisation des calculs d'absorption Accélération par utilisation de paramétrisation

Comparaison aux observations IASI avec la base ARSA



Thèse Viviana Voloninno

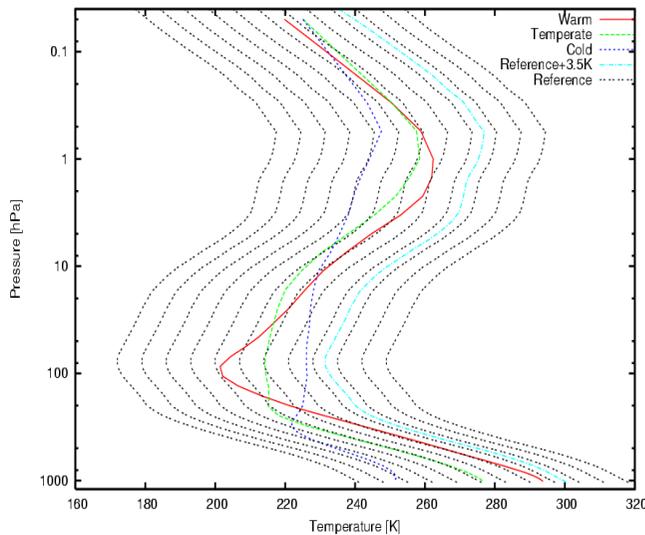
**Comment différencier les sources d'erreur (profil, spectro, paramétrisation) ?
→ intercomparaison avec 4A/OP, KOPRA et ARHAMIS**

Optimisation des calculs d'absorption Accélération par utilisation de LUT

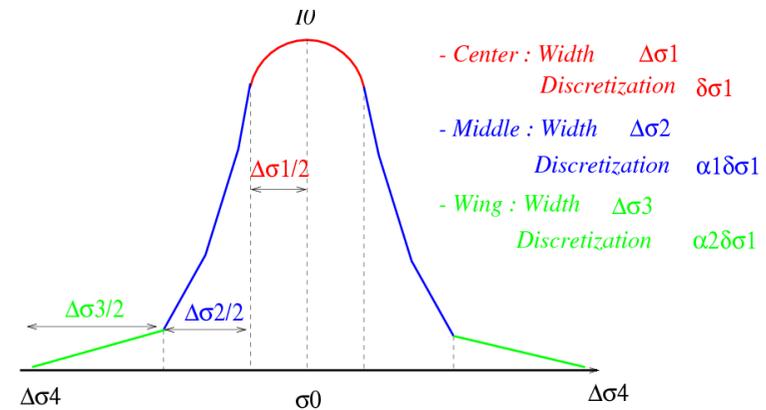
Pré-calculs des épaisseurs optiques de couche



Interpolation: P, T, ρ



Optimisation de la grille spectrale



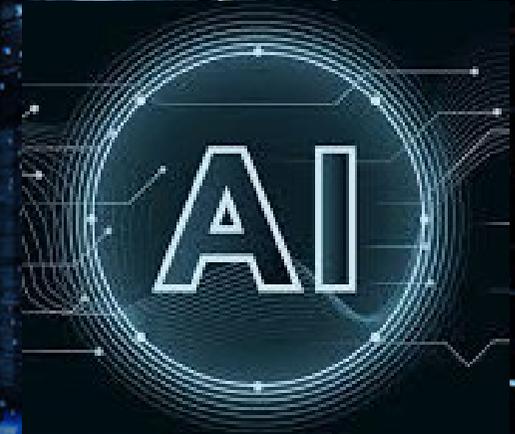
- 12 températures (pas de 7K)
→ interpolation linéaire
- Pression entre 1013 et 0.0025 hPa (43 levels)
→ interpolation en $\ln(P)$
- Epaisseur optique : $\sigma = \sigma_{atlas} * \rho / \rho_{atlas}$

Canaux fenêtres 2500 points
30001 points pour les autres



Optimisation matérielle et Intelligence Artificielle

High-Performance Computing (HPC)



© <https://community.fs.com/fr/article/the-role-of-data-centers-in-supporting-highperformance-computing-hpc.html>

Optimisation matérielle et Intelligence Artificielle



Augmentation des volumes de données, complexes & multidimensionnelles



Grand volume de données

- Réduction,
- Visualisation,
- Manipulation
- Analyse

Disciplines : Sciences de l'information et des données
(mathématique statistique)
Calcul à haute performance (HPC).

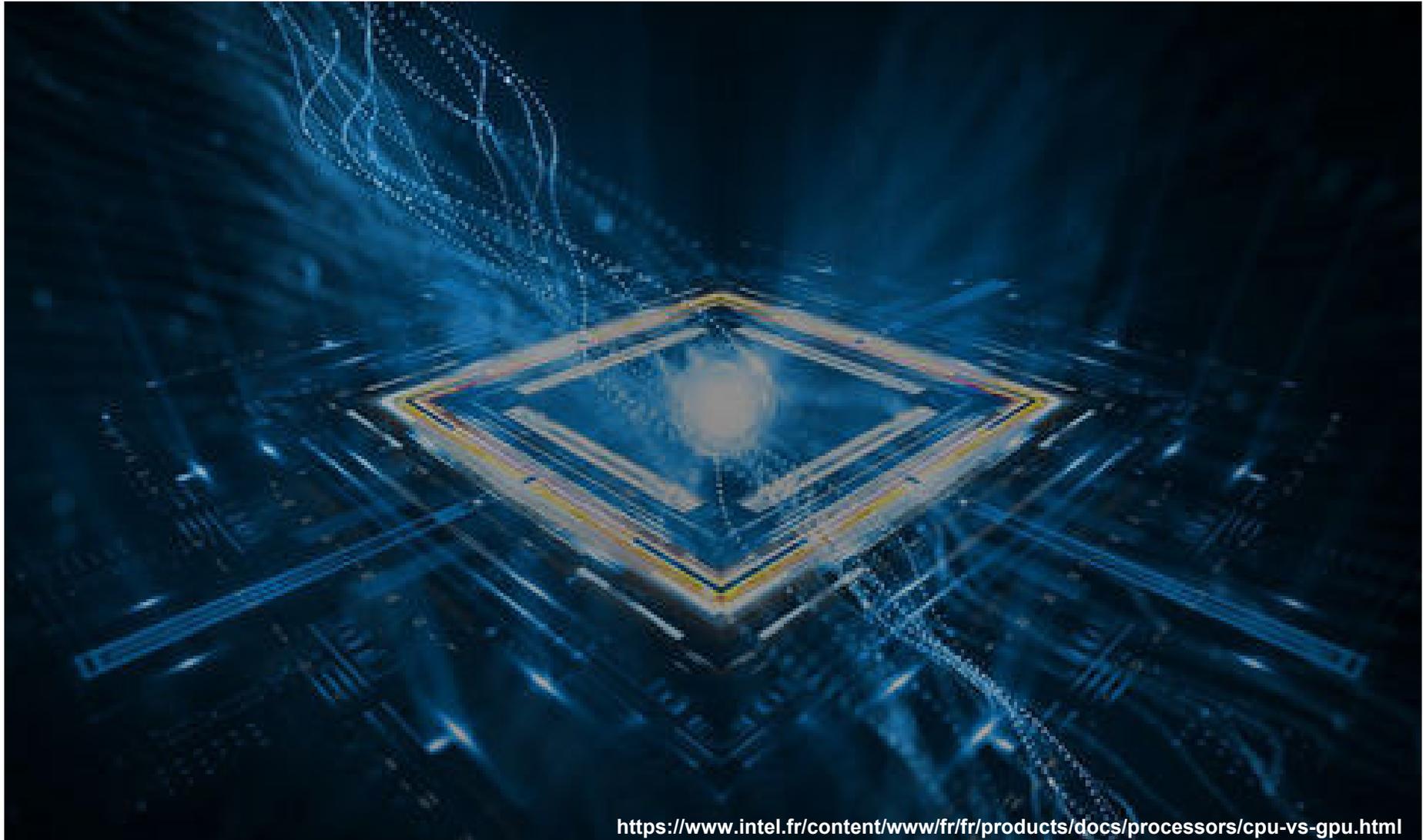
- ◆ Généralisation d'accélérateurs (comme les GPU) ◆ Parallélisme massif (>million de cœurs),
- ◆ Nouvelles architectures (processeurs ARM ou FPGA)

Nouveaux calculateurs avec une puissance de calcul supérieure à 10^{18} flops (opérations flottantes par seconde)



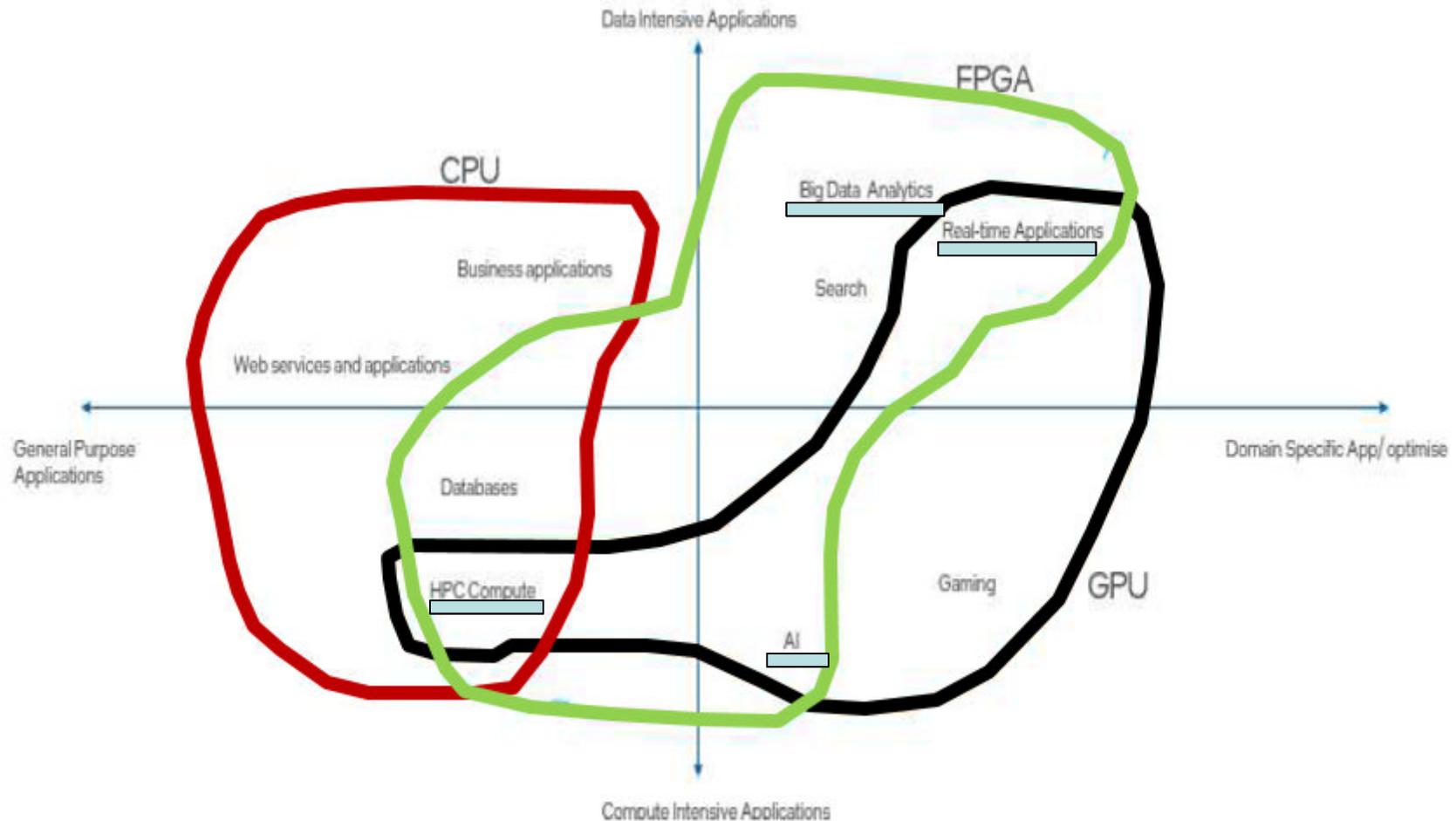
Gestion et l'interprétation de ces grands volumes de données impliqueront le recours massif aux outils d'IA.

Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles



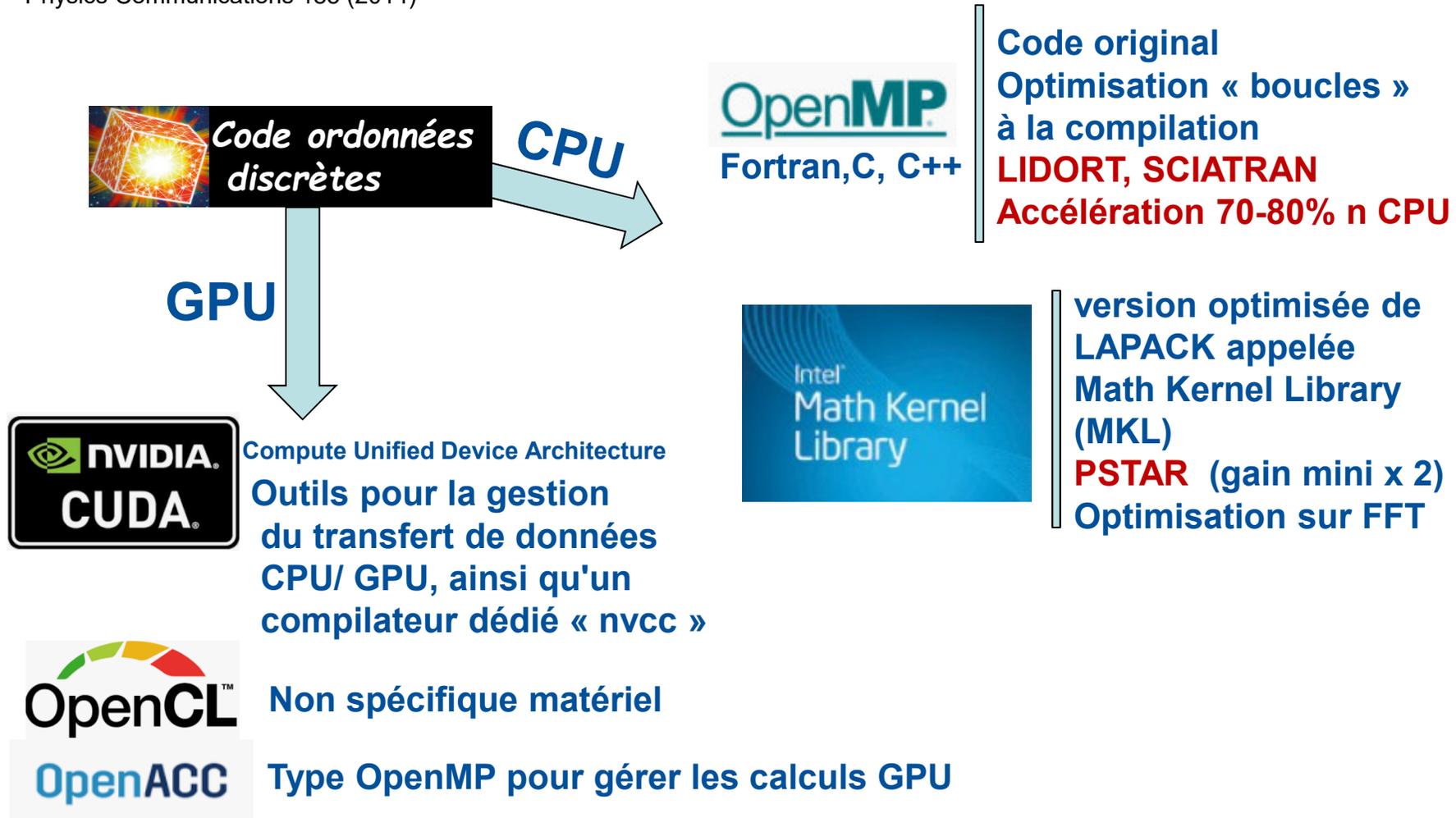
<https://www.intel.fr/content/www/fr/fr/products/docs/processors/cpu-vs-gpu.html>

Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles



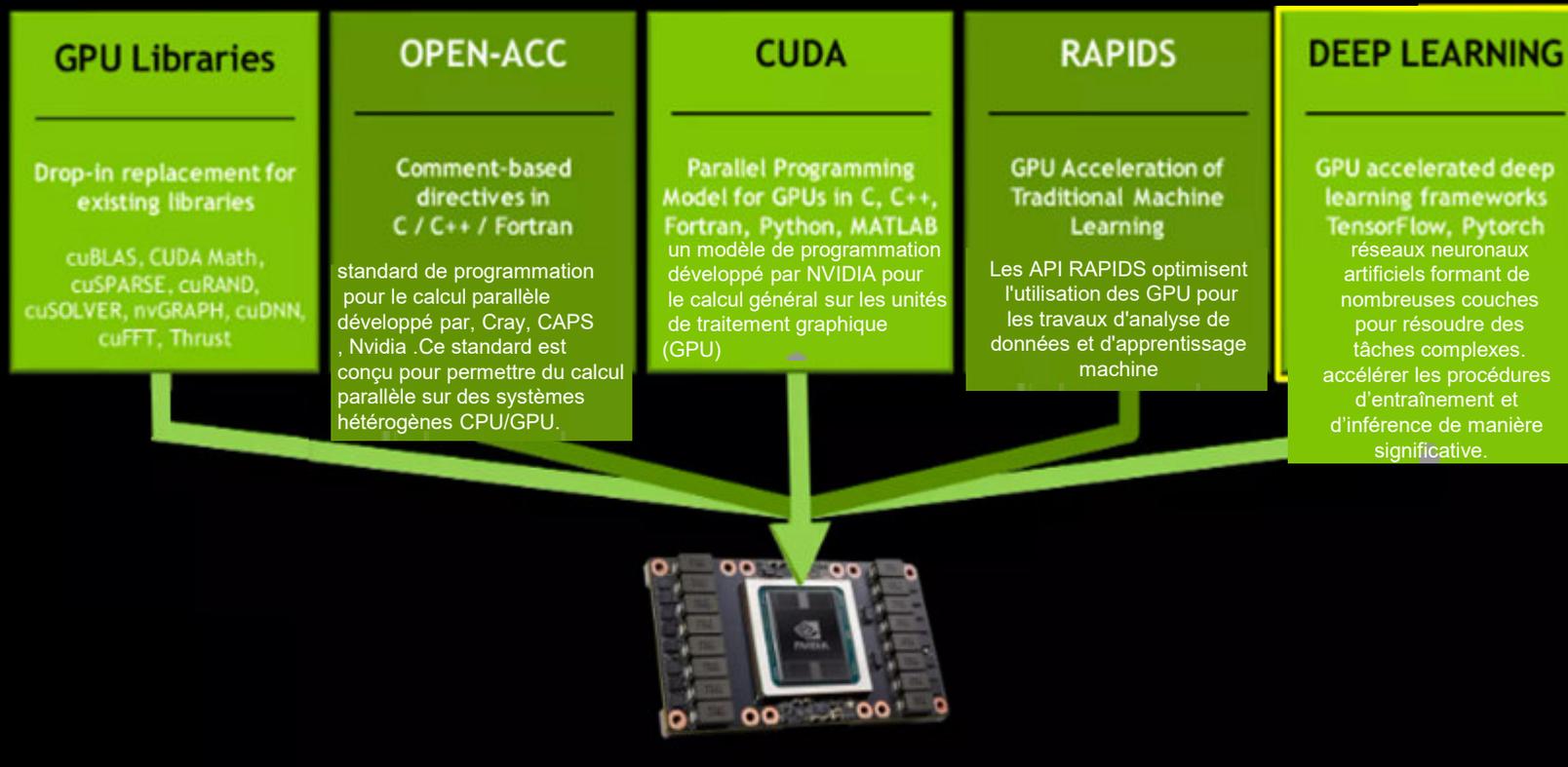
Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles

Multi-core-CPU and GPU-accelerated radiative transfer models based on the discrete ordinate method. Efremenko et al., Computer Physics Communications 185 (2014)



Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles

5 façons d'aborder le GPU



Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..)

Accélération par performances matérielles

Multi-core-CPU and GPU-accelerated radiative transfer models based on the discrete ordinate method. Efremenko et al., Computer Physics Communications 185 (2014)



OpenMP
Fortran, C, C++

Code original
Optimisation « boucles » à la compilation
LIDORT, SCIATRAN
Accélération 70-80% n CPU



version optimisée de LAPACK appelée Math Kernel Library (MKL)
PSTAR (gain mini x 2)
Optimisation sur FFT



Compute Unified Device Architecture
Outils pour la gestion du transfert de données CPU/ GPU, ainsi qu'un compilateur dédié « nvcc »



Non spécifique matériel



Type OpenMP pour gérer les calculs GPU

Gain GPU ?
Variations de plusieurs ordres de grandeur, selon l'algorithme et les caractéristiques de son implémentation

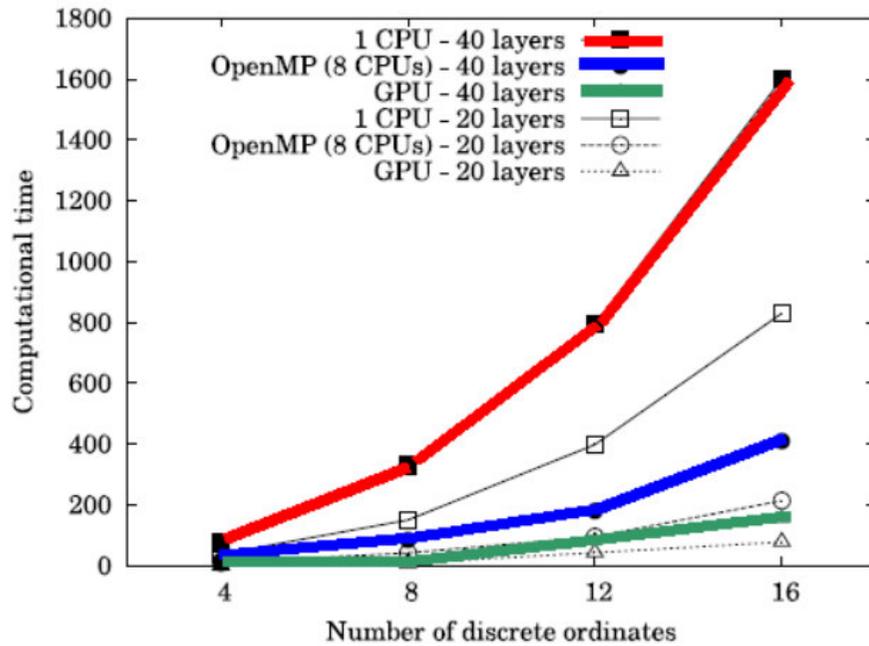
Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..)

Accélération par performances matérielles

Multi-core-CPU and GPU-accelerated radiative transfer models based on the discrete ordinate method. Efremenko et al., Computer Physics Communications 185 (2014)



Acceleration / CPU
 22 fois (8 DOM)
 35 fois (4 DOM)

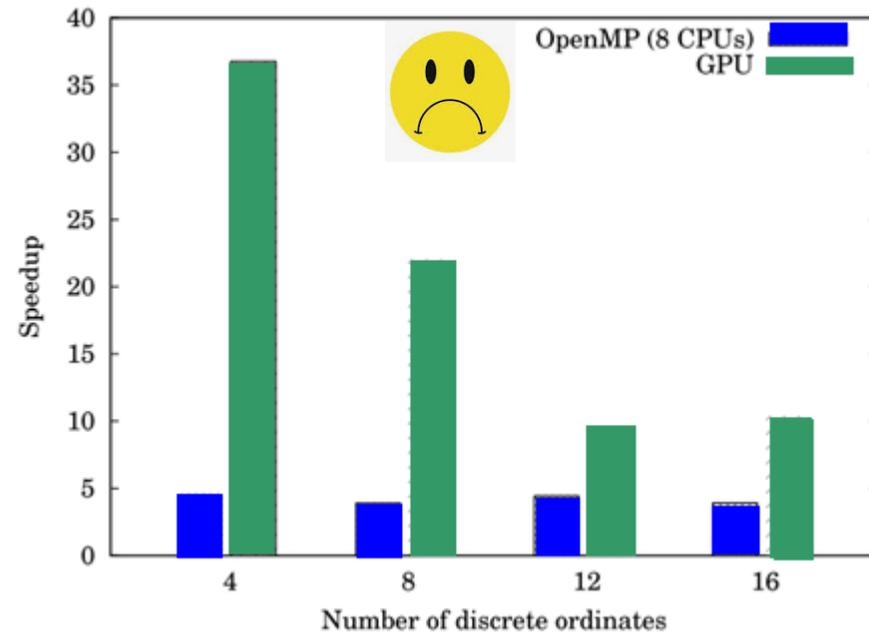


versus



Acceleration
 5 à 8 fois

Intel Xeon CPU
 E5-1620 3.60 GHz
 8 CPUs.



Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles

D'autres exemples :

Improved GPU/CUDA Based Parallel Weather and Research Forecast (WRF) Single Moment 5-class (WSM5) Cloud Microphysics
Mielikainen et al
IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing · August 2012

Weather Research and Forecasting (WRF)

Modèle microphysique - WSM5



Augmentation de la résolution spatiale dans modèles de prévisions
Croissance besoins microphysiques

Acceleration / CPU

206 fois (1 GPU) 357 fois (4GPU)



SMART-G, a Monte Carlo GPU Radiative Transfer code
HYGEOS pour le CNES



Simulation of radiance in limb geometry with atmospheric refraction
Simulation of topographic and 3D objects influence on radiance
Simulation of topographic and 3D objects influence on radiance
Simulation of 3D clouds

Modeling polarized radiative transfer in the ocean-atmosphere system with the GPU-accelerated SMART-G Monte Carlo code, Ramon, D., F. Steinmetz, D. Jolivet, M. Compiègne and R. Frouin Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 222–223, p89-107 (2019)

Acceleration
100 fois / CPU

Optimisation matérielle des calculs (CPU, GPU..) Accélération par performances matérielles

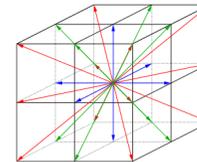
D'autres exemples :

A GPU-Accelerated Radiation Transfer Model
Using the Lattice Boltzmann Method
Yansen Wang et al
Atmosphere 2021, 12, 1316.



The Lattice Boltzmann Model - 3D
Similitude RTE et équation Boltzmann
Transport (espace, temps, angle)
Étude diffusion isotrope,
albédo diff simple (0.1~0.9) Epais. Opt.(0.1~12)

Acceleration
120 fois / CPU



Acceleration
10 (même CPU)
LBLRTM/ MC

SHDOM



THALES



SkyGen 3D : Transfert radiatif 3D rapide et génération d'images

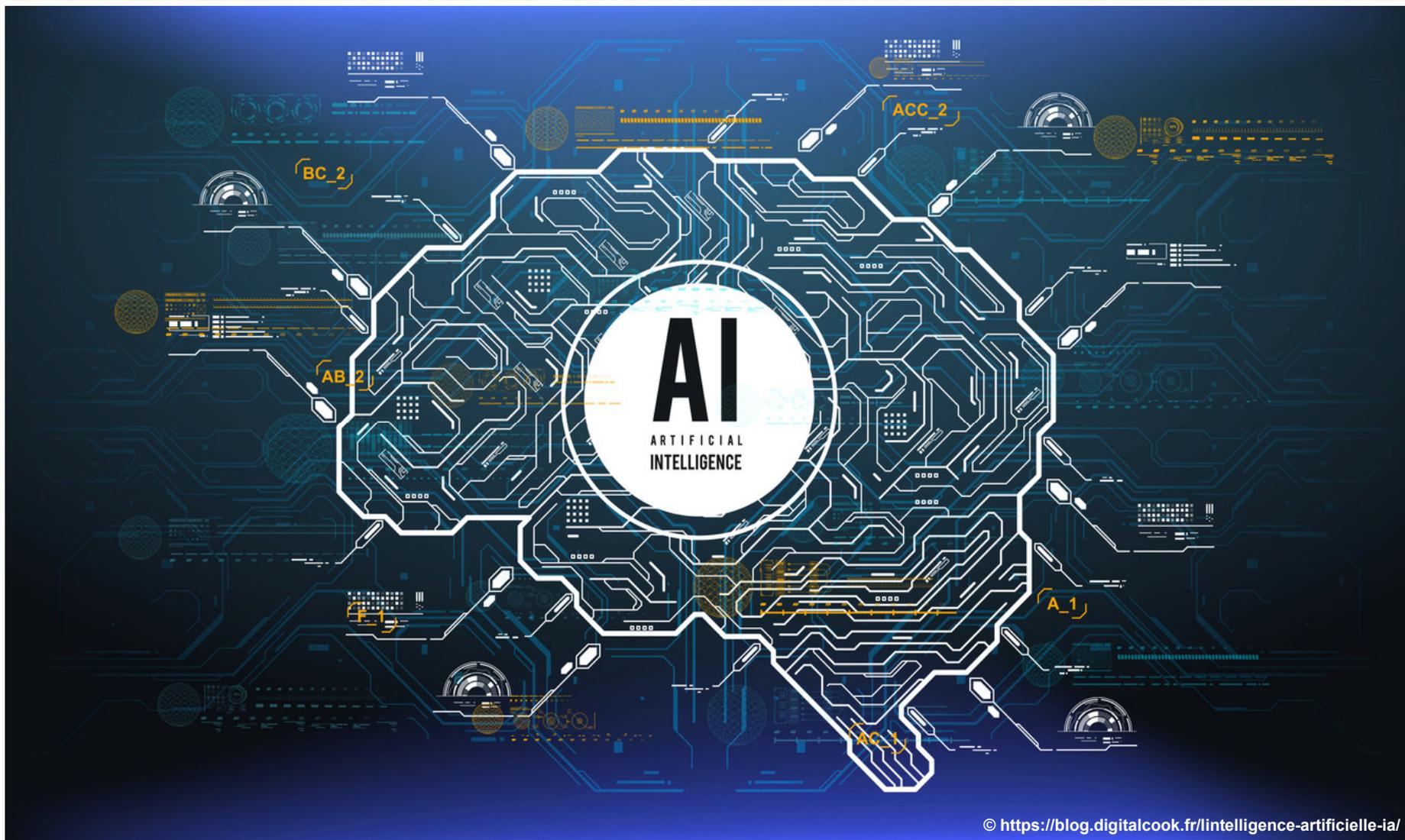
- ✓ Calcul de la fonction source : SHDOM = 4,1 minutes, **Optimisation = 48 secondes, soit 5x plus rapide**
- ✓ Calcul d'une image en luminance de 450 x 600 : SHDOM = 32,5 secondes, **Optimisation = 1,7 secondes, soit 19x plus rapide**
- ✓ Temps total = **50 secondes, 5x plus rapide**

**SHDOM
GPU**

**SHDOM
Original**
Plusieurs processeurs
via MPI
Message Passing Interface

Intelligence artificielle

Accélération par apprentissage



© <https://blog.digitalcook.fr/intelligence-artificielle-ia/>

Intelligence artificielle

Accélération par apprentissage

L'IA s'applique à tous les compartiments du transfert radiatif (émulation de modèles et inversion de paramètres):

- Flux LW/SW et taux de chauffage:
Lagerquist et al. (2021), Ukkonen (2022)
- Luminances / réflectances TOA (+ Jacobiens):
Liang et al. (2022) pour les MW, Le et al. (2020) dans le SWIR
- Effets radiatifs des nuages 3D:
Meyer et al. (2021)
- Transmittances:
Ukkonen and Hogan (2022), Stegmann et al. (2020)

Mais ce n'est pas si nouveau:

- Flux LW : Chevallier et al. (1998) (NeuroFlux: 22x vs WBM, 10^6 x vs 4A)
- Inversion nuages en milieu hétérogène: Cornet et al. (2004)

Intelligence artificielle

Accélération par apprentissage

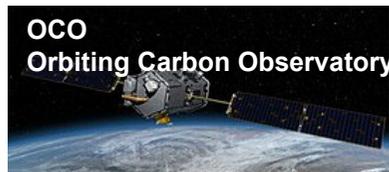
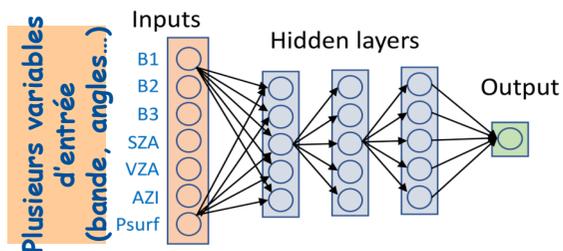


Les réseaux de neurones

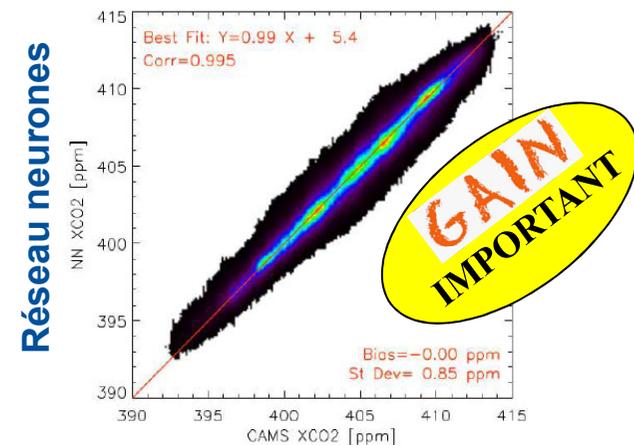
Avantages

- ◆ Flexibilités sur les applications
- ◆ Adaptation à des situations complexes et des observations hétérogènes (synergie instrumentale)
- ◆ Utilisation sur des applications pour lesquels nous ne disposons pas de modèles physiques suffisamment précis.

EXEMPLES D'UTILISATION



Bréon, F.-M., David, L., Chatelanaz, P., and Chevallier, F.: On the potential of a neural-network-based approach for estimating XCO₂ from OCO-2 measurements, Atmos. Meas. Tech., 15, 5219–5234

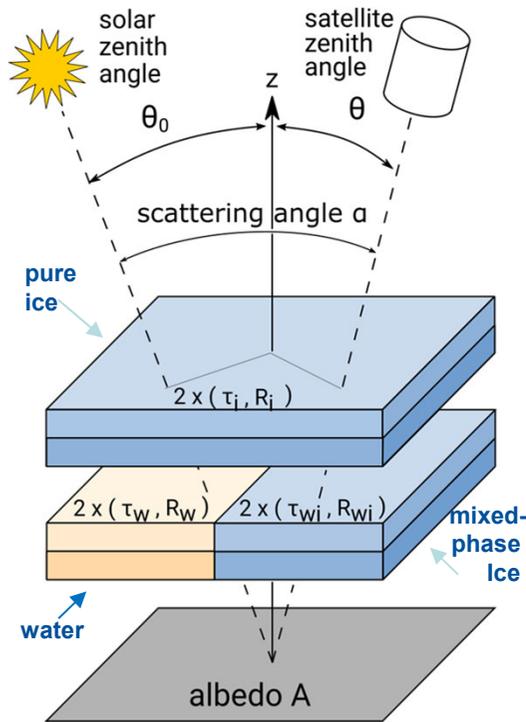


Modèle inversion

Intelligence artificielle

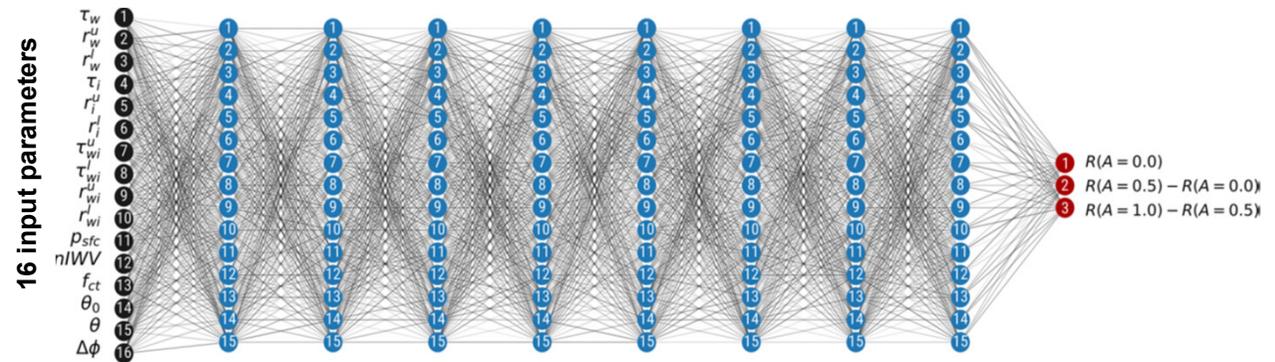
Accélération par apprentissage

MFASIS-NN in RTTOV 14 (MFASIS = Method for FAsT Satellite Image Synthesis)



Profil atmosphérique simplifié
(défini par 16 paramètres)

- Rapide ($<1\mu\text{sec/profil}$) et précis (erreur en réflectance < 0.01)
- Entraîné avec la méthode des ordonnées discrètes (DOM) pour les canaux solaires entre $0.4\mu\text{m}$ and $2.2\mu\text{m}$
- Les profils d'entrées (NWP) sont simplifiés et définis par 16 paramètres
- Apprentissage: $O(10^7)$ réflectances calculées à partir des profils simplifiés aléatoires



Scheck 2021 (<https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107841>)
Baur et al. 2023 (<https://doi.org/10.5194/amt-16-5305-2023>)

Intelligence artificielle Accélération par apprentissage



Les réseaux de neurones

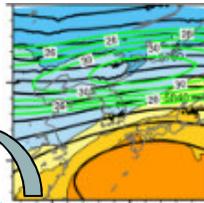
EXEMPLES D'UTILISATION

Utilisation pour calculs radiatifs en prévision météorologique

Song, H.-J., & Roh, S. (2021). Improved weather forecasting using neural network emulation for radiation parameterization. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*,

Korea Local Analysis and Prediction System (KLAPS)

Kim et al., 2002



RRTMG-K radiation

(Baek, 2017)

193 paramètres en entrée (profil PNT)
42 paramètres en sortie
Flux radiatifs LWIR/ SWIR et profil de
taux de chauffage

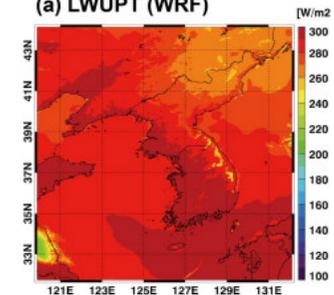
Rapid Radiative Transfer Model for
General Circulation Models

Apprentissage
1,44 milliard de données
entrées sorties RRTMG-K

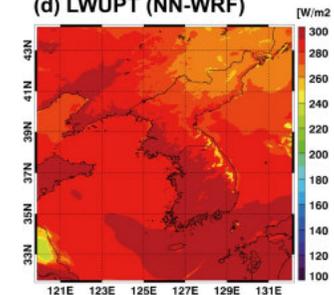
Accélération du
processus de
rayonnement de **60 fois**

Diminution du temps de
calcul total de **87 %**
dans le modèle WRF.

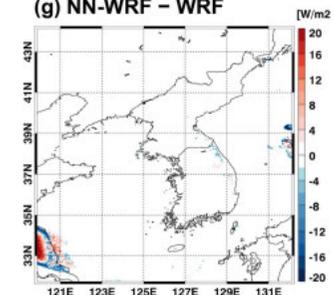
(a) LWUPT (WRF)



(d) LWUPT (NN-WRF)



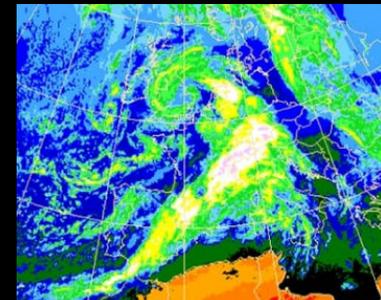
(g) NN-WRF - WRF



Des solutions ?



ALORS
ON FAIT
QUOI
?



Des solutions ?



« Profiling » informatique du code
identifier parties du code pour
Optimisation

Penser optimisation lors écriture
du code (en vue opérationnel)



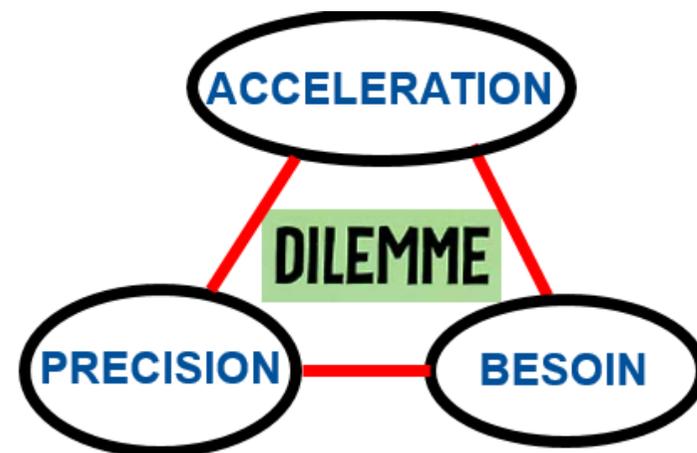
Gains très variables en fonction appels
Le portage = Un métier
Perte de modifications faciles / Expertise

3D opérationnel ? Résolutions spatiales fines ?
Calculs pour synergie instruments ?



Conclusion

- Multiples possibilités d'accélération des codes (mathématiques, matérielles, IA ...)
- Les gains accélération sont très variables en fonction de l'option retenue (2-5 ...plusieurs centaines)
- L'option matériel nécessite une écriture ou ré écriture optimisée (informaticien) perte expertise
- L'arrivée de l'IA optimise mais attention à ne pas perdre la maîtrise de la physique
- Des codes optimisés existent pour des besoins particuliers



Merci pour votre attention !

