

Versione parallela e Open-Source del modello FARM: recenti sviluppi e prospettive future

Muraro M. ARPA Piemonte, via Pio VII 9, 10135 Torino (TO),

massimo.muraro@arpa.piemonte.it

Bande S. ARPA Piemonte, via Pio VII 9, 10135 Torino (TO),

stefano.bande@arpa.piemonte.it

Marras G. F. CINECA, via Magnanelli 6/3, 40033 Casalecchio di Reno, Bologna (BO)

g.marras@cineca.it

G. Calori Arianet S.r.l., via Gilino 9, 20128 Milano (MI), g.calori@aria-net.it

C. Silibello Arianet S.r.l., via Gilino 9, 20128 Milano (MI), c.silibello@aria-net.it

La normativa europea e nazionale in ambito di qualità dell'aria assegna un ruolo sempre più ampio ed importante alle tecniche modellistiche, per la valutazione della qualità dell'aria e per la distribuzione delle informazioni al pubblico. ARPA Piemonte, sulla spinta delle indicazioni della normativa, ha messo a punto un complesso sistema modellistico multiscala, applicato da alcuni anni alla valutazione su base annuale dello stato di qualità dell'aria su base regionale e locale, alla realizzazione di previsioni, allo studio di episodi di inquinamento acuto. Le sempre maggiori esigenze operative hanno spinto alla realizzazione di una versione parallela del modello di qualità dell'aria FARM, parte integrante del sistema, altamente scalabile e performante e disponibile Open-Source.

INTRODUZIONE

La Direttiva 2008/50/CE del Parlamento Europeo relativa alla qualità dell'aria ambiente e per un'aria più pulita in Europa¹, recepita dal d.lgs 155 del 13 agosto 2010, evidenzia sempre più il ruolo delle tecniche modellistiche nella valutazione della qualità dell'aria, nella determinazione dei contributi delle diverse sorgenti (comparti emissivi, fonti naturali, sorgenti "lontane"), nella valutazione di piani e programmi per l'abbattimento dell'inquinamento e nella distribuzione delle informazioni al pubblico sulla qualità dell'aria tramite sistemi di previsione in tempo reale.

Coerentemente a tali indicazioni, nel corso degli ultimi anni ARPA Piemonte ha messo a punto un complesso sistema modellistico multiscala che consente lo studio di episodi di inquinamento acuto, la previsione ("forecast"/"nowcast"), la valutazione su base annuale dello stato di qualità dell'aria a scala regionale e locale, l'integrazione delle simulazioni modellistiche con le informazioni provenienti dalla rete di monitoraggio mediante l'utilizzo di "assimilazione dati".

Tale sistema è basato sul modello di trasporto e chimica dell'atmosfera FARM (*Flexible Air Quality Regional Model*, Gariazzo *et al.*, 2007; Silibello *et al.*, 2008; Calori e Silibello, 2009) che è altresì utilizzato nel Progetto Nazionale MINNI (*Modello Integrato Nazionale a supporto della Negoziazione internazionale sui temi dell'Inquinamento atmosferico*, <http://www.minni.org>), coordinato dall'ENEA, allo scopo di fornire un supporto al Ministero dell'Ambiente relativamente ai piani ed ai programmi di risanamento della qualità dell'aria a scala nazionale e regionale, ed all'interno delle attività regionali condotte da diverse Agenzie in materia di valutazione della qualità dell'aria, predisposizione di piani di

¹ The European Parliament, 2008 "Directive 2008/50/CE of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 on ambient air quality and cleaner air for Europe"

risanamento e per la previsione.

Le crescenti esigenze di tempo di calcolo, dovute tanto alla sempre maggior complessità delle equazioni che descrivono i processi ed i meccanismi chimici, quanto alle richieste di applicare le tecniche modellistiche a periodi pluriennali, su domini più vasti e con maggior risoluzione, hanno spinto alla realizzazione di una versione parallela del modello FARM, capace di un utilizzo simultaneo efficiente di un gran numero di processori di calcolo.

IL MODELLO FARM

L'evoluzione temporale delle diverse specie chimiche presenti in atmosfera viene simulata in FARM mediante l'utilizzo di un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali che descrive i principali processi chimico-fisici: emissioni, trasporto e diffusione, reazioni chimiche e rimozione dovuta ai processi di deposizione secca ed umida. Una descrizione delle caratteristiche del modello è reperibile negli inventari di modelli messi a punto nell'ambito rispettivamente dell'azione COST728 "*Enhancing Meso-scale Meteorological Modelling Capabilities for Air Pollution and Dispersion Applications*" (<http://www.mi.uni-hamburg.de/Model-Inventory.504.0.html>) e del Model Documentation System (MDS) messo a punto dall'European Environment Agency, European Topic Centre on Air and Climate Change (ECC/ACC; <http://pandora.meng.auth.gr/mds/showlong.php?id=130>). Il modello è configurabile in modo da poter essere utilizzato in molteplici situazioni, a seconda delle richieste specifiche, delle risorse e dei dati disponibili.

FARM è inoltre predisposto per applicazioni multiscala, volte alla realizzazione di simulazioni su griglie di calcolo differenti, aventi domini di varia estensione e con diversa risoluzione. La gestione in un unico *run* di un numero arbitrario di griglie di calcolo annidate su livelli multipli, con risoluzione via via crescente, viene realizzata nel corso dell'esecuzione di un'unica simulazione tramite tecniche di *nesting one-way* e *two-way*. Nel primo caso all'inizio di ogni intervallo di calcolo le concentrazioni calcolate sulla griglia con risoluzione minore vengono passate a ciascuna griglia innestata in esso contenuta (con risoluzione maggiore), attraverso l'assegnazione delle condizioni al contorno; con il *two-way nesting* inoltre al termine di ogni intervallo le concentrazioni calcolate su ciascuna griglia a maggior risoluzione vengono utilizzati per aggiornare la griglia più esterna (meno risolta), nelle regioni di sovrapposizione.

Per le applicazioni indirizzate alla valutazione della qualità dell'aria ed all'analisi del relativo stato è utile avvalersi della possibilità di assimilare misure ed osservazioni nel corso della simulazione, in modo da renderla il più possibile prossima alla descrizione dello stato effettivo dell'inquinamento atmosferico. FARM prevede la possibilità di applicare tecniche di *nudging* per assimilare sia singole osservazioni (*observational nudging*) che campi di analisi (*objective analysis*).

LA PARALLELIZZAZIONE

Il modello FARM nasce come modello seriale; con il crescere della complessità del modello stesso e delle relative esigenze di utilizzo si è manifestata l'esigenza di utilizzare risorse di calcolo più ingenti per l'effettuazione delle simulazioni, ed è stata quindi predisposta una prima versione parallela a memoria condivisa (paradigma OpenMP).

Successivamente ARPA Piemonte si è fatta promotrice di un'iniziativa di collaborazione con *Arianet* e con l'*High Performance System Group* del centro di calcolo *CINECA*, per giungere ad una più completa parallelizzazione del codice modellistico, tramite l'utilizzo dei paradigmi MPI e Ibrido OpenMP-MPI.

PARALLELIZZAZIONE A MEMORIA CONDIVISA

La parallelizzazione tramite paradigma OpenMP è realizzata tramite direttive di compilazione, librerie e variabili d'ambiente che consentono una parallelizzazione di programmi in Fortran e C/C++ su sistemi a memoria condivisa.

La sua applicazione consente di effettuare una parallelizzazione del codice senza apportare stravolgimenti nella scrittura e nell'impostazione del codice stesso e nella strutturazione e gestione dei dati in memoria.

Nella versione parallela di FARM i calcoli legati al trasporto ed alla chimica degli inquinanti sono distribuiti tra i nodi secondo lo schema:

- ⤴ trasporto lungo la direzione x: ripartito in cicli nella direzione y;
- ⤴ trasporto lungo la direzione y: ripartito in cicli nella direzione x;
- ⤴ trasporto lungo la direzione z e chimica: ripartiti in cicli nelle direzioni x ed y.

Il limite nella distribuzione delle operazioni computazionali e nel miglioramento delle performance del modello è rappresentato dalla disponibilità di *core* a memoria condivisa sul sistema di calcolo. In figura 1 viene mostrato l'andamento dello *speedup* (rapporto tra il tempo di calcolo della versione seriale e quello della versione parallela) all'aumentare del numero di core disponibili con una configurazione di FARM parallelizzata con OpenMP.

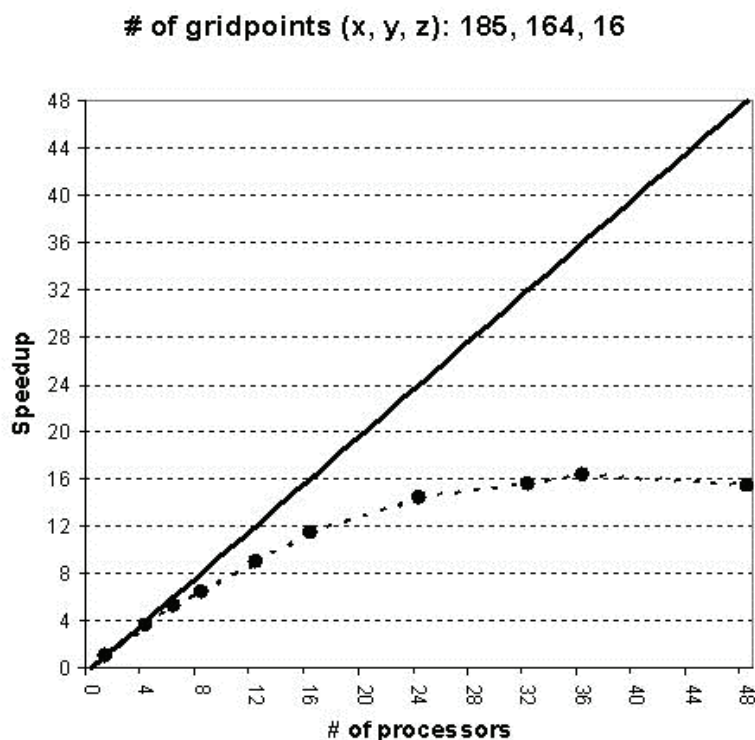


Figura 1: Aumento dello *speedup* all'aumentare del numero di *core* disponibili con una configurazione parallelizzata con OpenMP.

PARALLELIZZAZIONE A MEMORIA DISTRIBUITA

In seguito è stata introdotta una parallelizzazione completa nel codice, tramite *Message Passing Interface (MPI)*, che può essere applicata a tutte le griglie utilizzate in un determinato *run* (Marras et al., 2012). La parallelizzazione *MPI* è stata implementata con una configurazione *master-worker* dei processi; il processo *master* è unico per tutte le griglie innestate di uno medesimo *run*, si occupa delle operazioni di input/output (lettura dei file di input e scrittura dei risultati) e delle operazioni di distribuzione e raccolta dei dati tra i processi *workers*. I processi *workers* risolvono invece i processi di trasporto, diffusione e trasformazione chimica su porzioni delle griglie di calcolo opportunamente partizionate e si dividono in *H-worker* (operatori orizzontali) e *V-worker* (operatori verticali). Gli operatori *master* e *worker* vengono definiti all'avvio della simulazione e dipendono dal numero di punti-griglia nelle direzioni *x*, *y* e *z*. L'integrazione sulle griglie viene effettuata in maniera sequenziale e quindi ciascun processo *Worker* può essere *H-worker* e/o *V-worker* per ciascun punto-griglia. La configurazione *master-worker* consente inoltre la sovrapposizione delle operazioni di input/output e quelle computazionali, con una conseguente maggior efficienza del sistema.

Il dominio di calcolo viene scomposto lungo la direzione *z* (*H-decomposition*) e lungo le direzioni *x-y* (*V-decomposition*). Nella *H-decomposition* gli *H-worker* risolvono i processi di trasporto lungo *x* ed *y* e la scalabilità delle operazioni computazionali è limitata dal numero di punti griglia nella direzione *z*. Nella *V-decomposition* i processi *V-worker* risolvono i processi del trasporto nella direzione *z* e delle trasformazioni chimiche. In questo caso i limiti di scalabilità sono determinati dal prodotto del numero di punti-griglia nelle direzioni *x* e *y* e ci si assicura quindi la possibilità di scalare su un gran quantità di nodi, dal momento che il trasporto lungo *z* e le trasformazioni chimiche occupano gran parte dei tempi di calcolo.

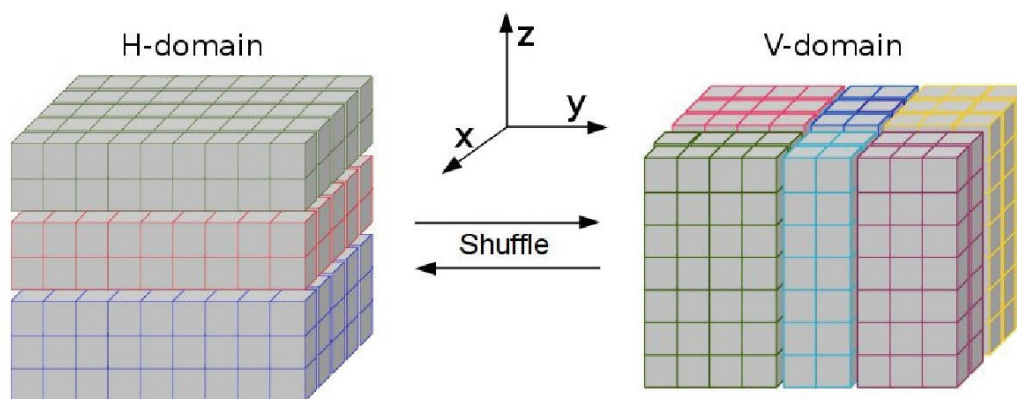


Figura 2: Scomposizione del dominio di calcolo con *HV-partitioning*.

PARALLELIZZAZIONE IBRIDA

Le direttive della parallelizzazione OpenMP e MPI sono state implementate in modo da

essere completamente indipendenti. Questo permette di configurare una parallelizzazione ibrida (OpenMP-MPI) senza apportare ulteriori cambiamenti nel codice sorgente. La parallelizzazione *ibrida* di FARM è configurata secondo le seguenti modalità:

⤴ *H-decomposition*:

- trasporto lungo x: il dominio lungo z è partizionato tra gli *H-workers* mentre il dominio lungo y è distribuito fra i thread tramite le direttive OpenMP;
- trasporto lungo y: lungo z il dominio è partizionato tra gli *H-workers* mentre la direzione x è distribuita fra i thread tramite le direttive OpenMP.

⤴ *V-decomposition*:

- trasporto lungo z e chimica: il dominio lungo le direzioni x e y è partizionato tra i *V-workers*. La direzione y è ulteriormente distribuita fra i thread sempre tramite le direttive OpenMP.

La parallelizzazione ibrida consente di diminuire, a parità di risorse di calcolo utilizzate, il numero di processori coinvolti nella parallelizzazione MPI, e di conseguenza il relativo traffico di rete tra i nodi di calcolo; in questo modo si ottiene anche un miglior bilanciamento del carico sulle risorse disponibili. Con questo tipo di parallelizzazione si spostano i limiti di scalabilità legati alla configurazione dei precedenti paradigmi; infatti per ogni decomposizione del dominio, ed in particolare lungo la direzione z dove le limitazioni di *MPI* sono più stringenti, si può far conto sul numero di punti-griglia nella specifica direzione, e per ciascuno di essi per il numero di core disponibili per ciascun processore.

RISULTATI E CONCLUSIONI

Le capacità di scalabilità del modello FARM nelle configurazioni con parallelizzazione MPI e parallelizzazione ibrida, sono state verificate all'aumentare del numero di processori disponibili. Nella figura 3 e nella figura 4 vengono riportati (in termini di tempo di calcolo e di *speedup*) i risultati delle prove effettuate su due cluster di calcolo, PLX e ARPAP (caratteristiche riportate nelle tabelle 1 e 2). Le versioni parallele del codice mostrano un evidente miglioramento delle prestazioni all'aumentare del numero di processori disponibili. Fino ad un numero di processori vicino a 50 le prestazioni delle due configurazioni risultano estremamente simili; all'ulteriore aumento delle risorse di calcolo la parallelizzazione MPI mostra un arresto ed addirittura un peggioramento delle prestazioni. La parallelizzazione ibrida mostra invece ulteriori potenzialità di scalabilità e un continuo miglioramento delle prestazioni anche con numeri superiori di processori, a conferma di quanto esposto nel paragrafo precedente.

La versione ottimizzata e potenziata del modello FARM, si presenta dunque attualmente con quattro possibili configurazioni di funzionamento: seriale, parallelizzazione OpenMP, parallelizzazione MPI, parallelizzazione ibrida (OpenMP-MPI). In occasione delle attività di parallelizzazione si è operata anche una profonda revisione dell'intero codice, ottimizzandone e perfezionandone l'architettura e la scrittura, per aumentare l'affidabilità e l'efficienza, nonché la compatibilità con le metodologie di parallelizzazione introdotte.

Il modello FARM è ora disponibile come codice sorgente *Open-Source*, utilizzabile su differenti piattaforme di calcolo basate su differenti architetture e con diversi compilatori.

Futuri possibili sviluppi delle metodologie di parallelizzazione del modello riguardano la possibilità di definire manualmente la decomposizione dei domini, attualmente stabilita in maniera automatica nelle fasi di inizializzazione del *run*, per ottenere configurazioni

ulteriormente ottimizzate. Miglioramenti aggiuntivi potrebbero inoltre derivare dall'introduzione di una scrittura delle equazioni relative ai processi chimici che ottimizzi i processi di trasferimento dei dati nelle direttive MPI.

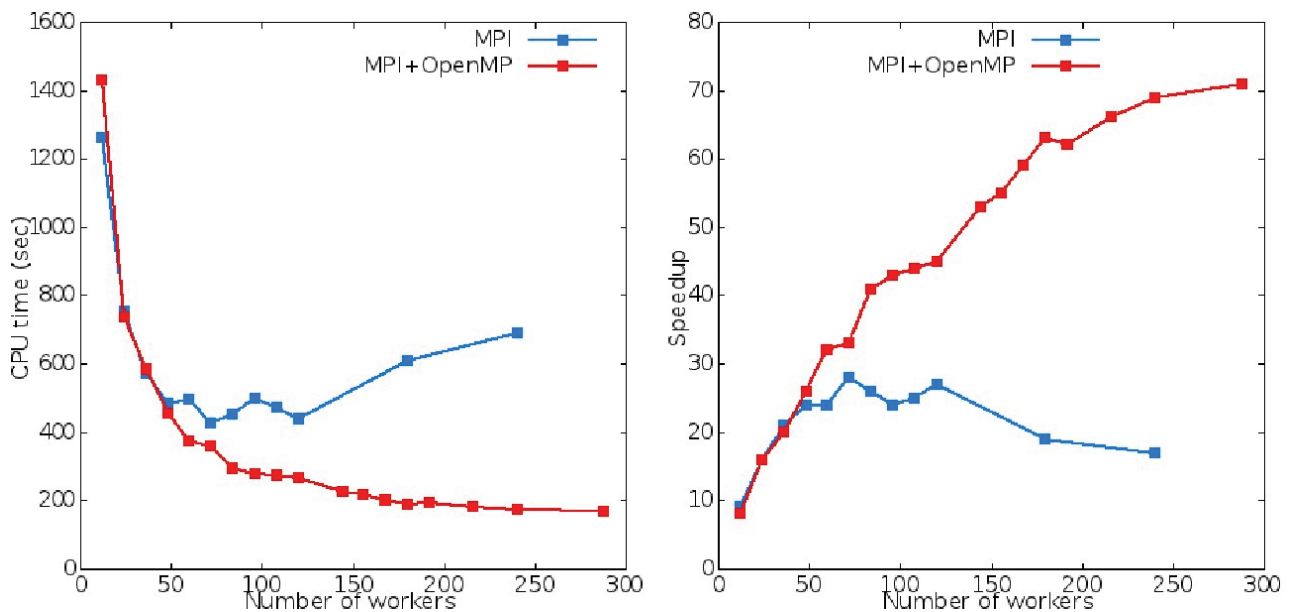


Figura 3: Andamento di CPU time e *speedup* all'aumentare dei processi *worker* per il cluster PLX.

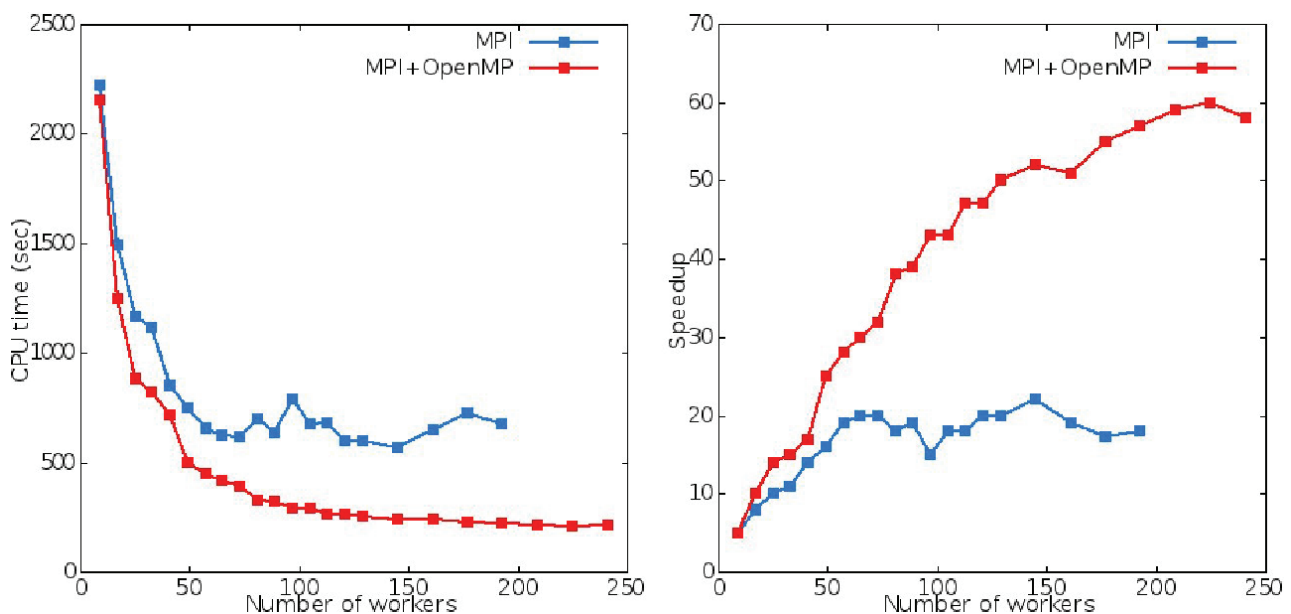


Figura 4: Andamento di CPU time e *speedup* all'aumentare dei processi *worker* per il cluster ARPAP.

Tabella 1: Caratteristiche del cluster PLX

Processor type:	2 six-cores Intel Xeon (Esa-Core Westmere) E5645 2.4GHz
Number of nodes:	247 compute
Number of cores:	3288

Internal Network:	Infiniband with 4xQDR switches (40 Gbps)
Number of GPUs:	528 nVIDIA Tesla M2070 + 20 nVIDIA Tesla M2070Q
RAM:	14 TB (48 GB/compute node)
Operating System	RedHat 4.1.2-50

Tabella 2: Caratteristiche del cluster ARPAP

Processor type:	2 quad-cores Intel Xeon (Nehalem) E5520 2.27 GHz
Number of nodes:	32 compute
Number of cores:	256
Internal Network:	Infiniband with 4xDDR switches (20 Gbps)
RAM:	160 GB (4 GB/compute node)
Operating System	RedHat 4.1.2-44

BIBLIOGRAFIA

- ✧ Calori, G., Silibello, C., 2009 “*FARM – Model formulation and user manual. Version 3.1*”, Technical documentation, Arianet, October 2009.
- ✧ Gariazzo, C., Silibello, C., Finardi, S., Radice, P., Piersanti, A., Calori, G., Cucinato, A., Perrino, C., Nussio, F., Cagnoli, M., Pelliccioni, A., Gobbi, G.P., Di Filippo, P., 2007 “*A gas/aerosol air pollutants study over the urban area of Rome using a comprehensive chemical transport model*”, 2007, Atmospheric Environment, 41, 7286-7303.
- ✧ Marras G. F., Silibello C., Calori G., “*An Hybrid parallelization of Air Quality Model with MPI and OpenMP*”, submitted for acceptance at 19th EuroMPI conference (Vienna), 2012.
- ✧ Silibello, C., Calori, G., Brusasca, G., Giudici, A., Angelino, E., Fossati, G., Peroni, E., Buganza, E., “*Modelling of PM10 concentrations over milano urban area using two aerosol modules*”, 2008, Environmental Modelling and Software, 23, 333-343.