



# **Un nouveau modèle pour remplacer CHRONOS ou Le début d'une grande aventure**

Louis-Philippe Crevier, Mike Moran,  
Richard Moffet, Véronique Bouchet,  
Sylvain Ménard et l'équipe GEM-AQFM 2007

# Plan

- Préface
- Revue de CHRONOS et AURAMS
- Quelques problèmes avec ces modèles
- La solution choisie pour affronter ces problèmes
- Le plan de match
- Liens avec d'autres projets

## **Préface: Division des applications de modèles en qualité de l'air**

- **Historique:**

- **En 2001**: création d'un groupe de modélisation de la qualité de l'air à l'intérieur de la division des urgences (qui comptait alors environ 5 personnes)

- **En août 2004**: Michel Jean devient directeur des opérations et son poste de chef des urgences/qualité de l'air est scindé en deux. La division compte alors environ 20 personnes.

- Le groupe de qualité de l'air est, depuis 1 an, **une division à part entière de la direction des opérations.**

# Préface: Mandats de la division des applications de modèles en qualité de l'air

- **Air Quality Forecasts**

- Prepare models & tools for operation and support real-time operations (models)
- Prepare model-ready emission files
- Participate in real-time evaluation (user group)

- **Air Quality Scenarios**

- Support development of policies, national and international assessments
- Prepare model-ready emission files
- Real-time and case studies (AQ models & trajectories)

- **Support to Regions**

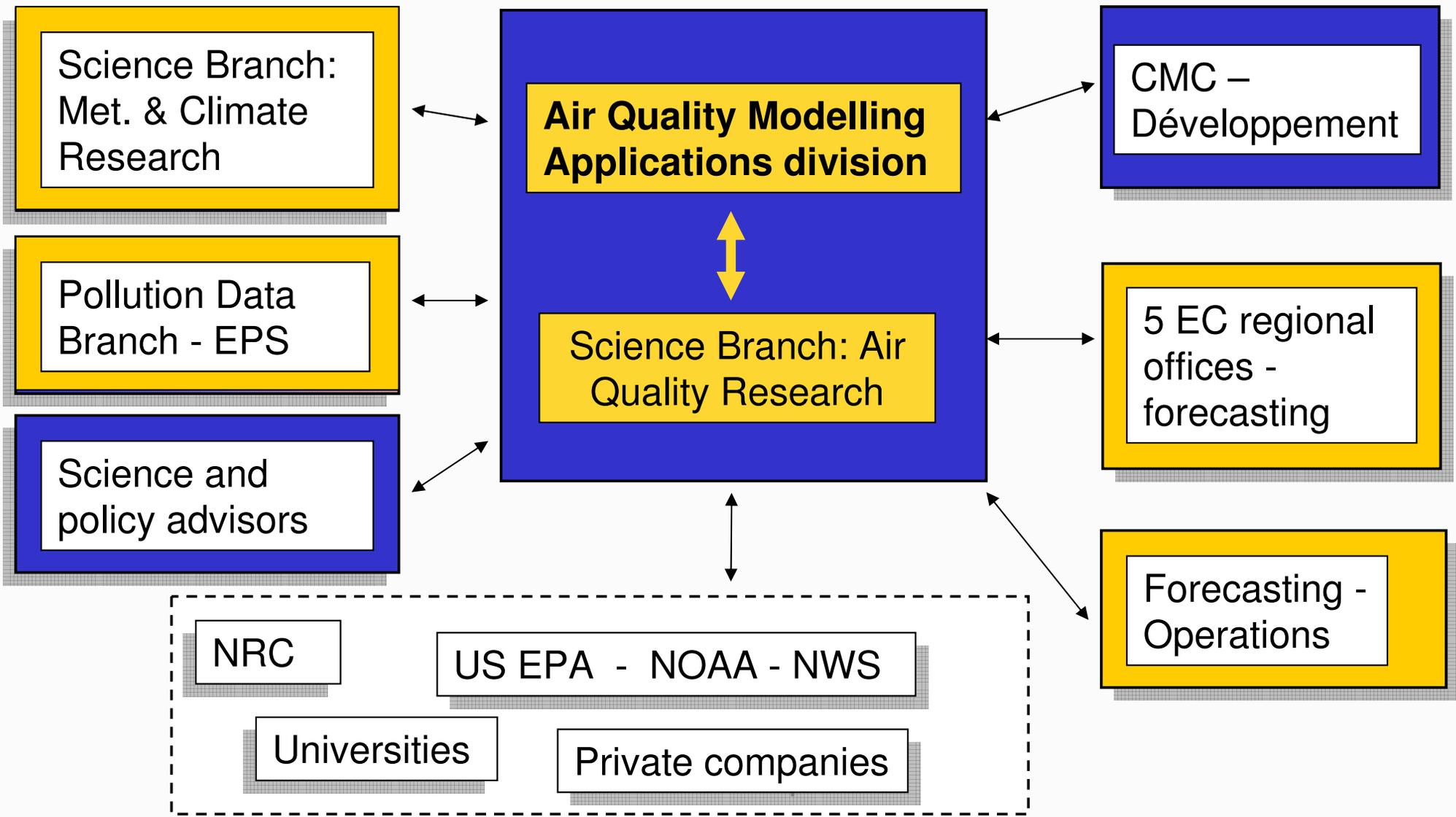
- Support modellers in Regions with implementation of air quality models and analysis tools (tool box, trajectories)

- **Support to air quality field campaigns**

- Provide tailored products for field campaigns



# Préface: Intervenants dans la modélisation et prévision de la qualité de l'air au CMC

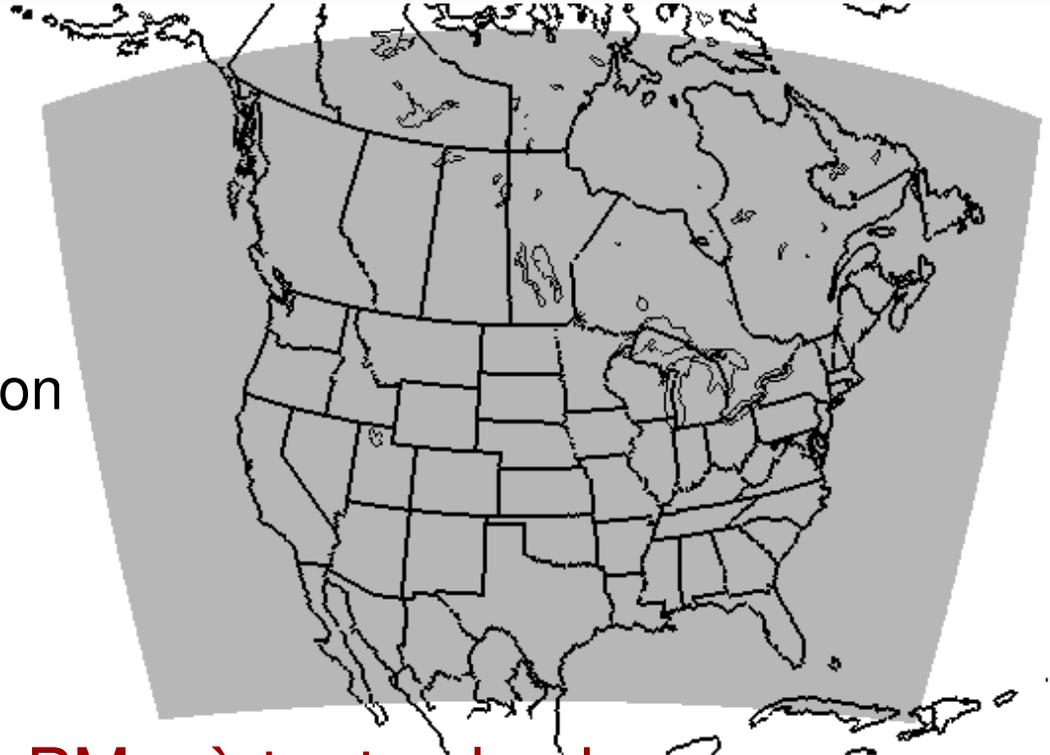


## Un peu d'histoire sur CHRONOS

- CHRONOS (Canadian Hemispheric and Regional Ozone and NOx System) a été conçu à l'origine pour prévoir les concentrations d'ozone.
- En 1999, a été le premier modèle opérationnel de prévision de la qualité de l'air au monde.
- Depuis, la prévision des particules fines a été ajoutée à CHRONOS.

# Configuration courante de CHRONOS

- Une prévision de 48h par jour à 00 UTC
- **Domaine:**  
Continental à 21 km sur projection polaire stéréographique
- **Niveaux verticaux:**  
24 niveaux gal-chen, toit à 8 km
- Prévisions d'ozone,  $PM_{2.5}$  et  $PM_{10}$  à toutes les heures
- Émissions de l'année 2000 (Canada) et 2001 (US)
- **Aucune assimilation de données chimiques**  
Le modèle est initialisé à l'aide de la prévision 24h de la veille.



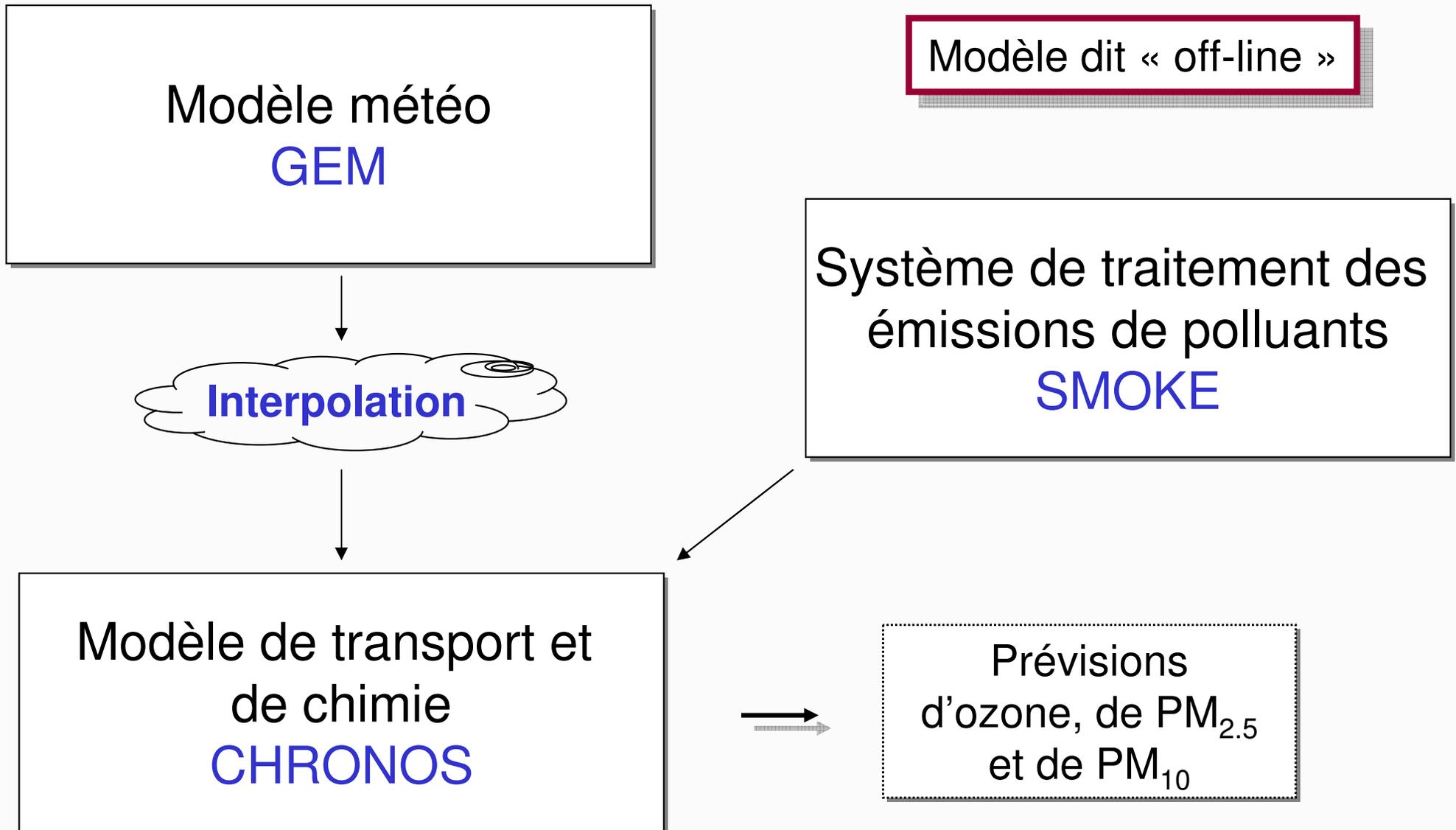
## Performance de CHRONOS

- La performance de CHRONOS est adéquate et on voit une constante amélioration d'une année à l'autre.
- Lors de l'exercice d'intercomparaison de modèles durant ICARTT en 2004, CHRONOS n'a rien eu à envier aux modèles américains présents.
- **Fait à noter:** la performance du **jour 2** de CHRONOS est généralement égale à celle pour le **jour 1**.
  - Les émissions sont une contrainte importante pour les prévisions

# **Système de prévision de la qualité de l'air du CMC: Comment ça marche?**

- **Système à trois composantes:**
  - **Modèle photochimique (CHRONOS)**
    - Intègre dans le temps et l'espace les équations photochimiques
  - **Modèle météorologique (GEM)**
    - Fournit les conditions météo nécessaires au modèle chimique
  - **Système de traitement des émissions (SMOKE)**
    - « Formatte » et génère les champs d'émissions nécessaires au modèle chimique

# Systeme de prévision de la qualité de l'air du CMC



# Systeme de traitement des émissions

- **Emissions inventory:**
  - Database of emissions (measured, estimated or modelled)
- **Emissions model:**
  - Models/calculates pollutant emissions based on specific factors and data for a particular sector *e.g.*
    - mobile emissions: fleet characteristics, VKT, temperature
    - biogenic emissions: temperature, radiation, vegetation maps
- **Emissions processor:**
  - Maps, in ***time, space and species***, an emissions inventory (and/or modelled emissions) to ***CTM-ready*** format (e.g. SMOKE)

## **Système de traitement des émissions**

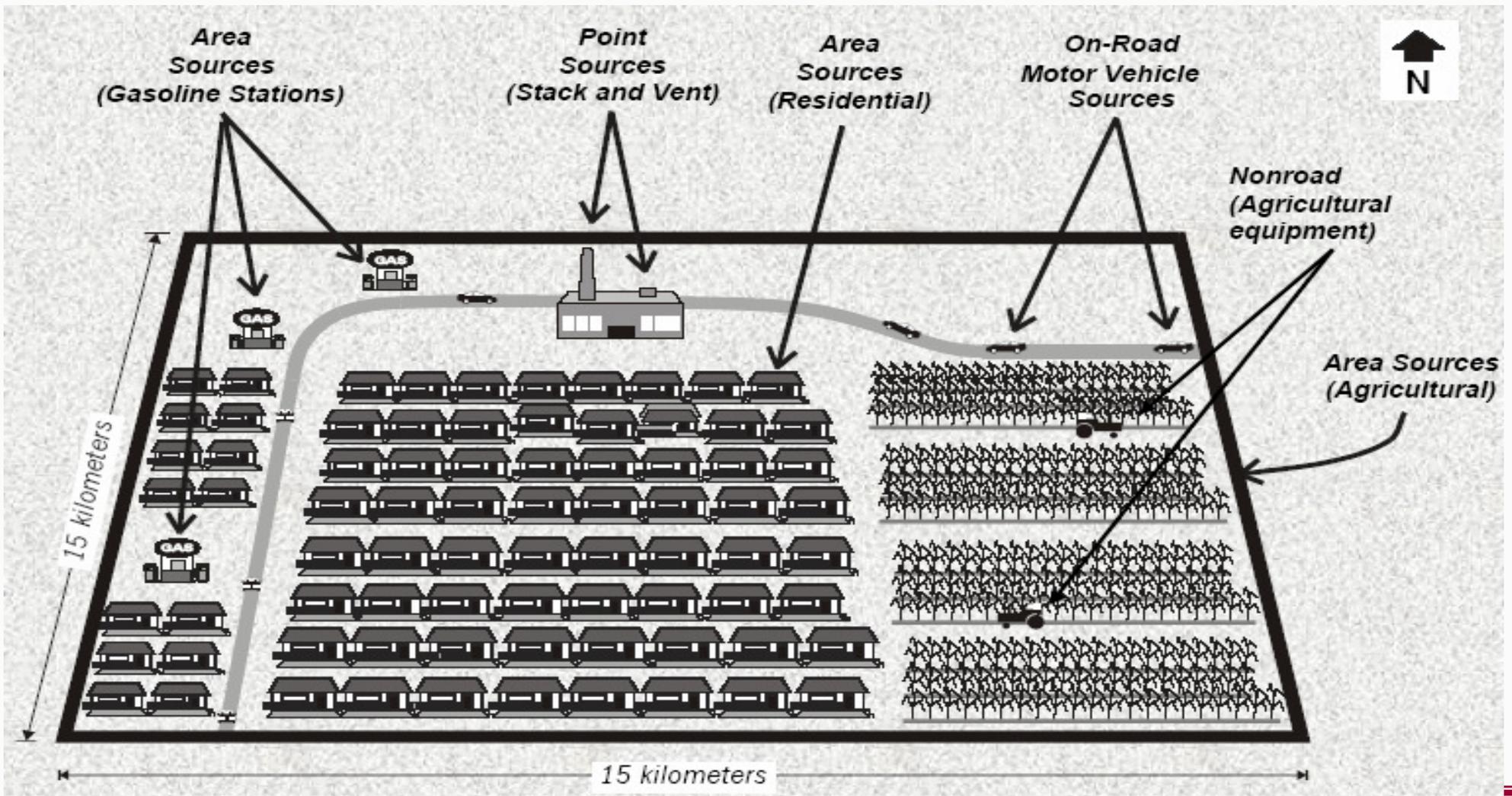
- Emissions processors take an annual, province-level CAC inventory and transform it into hourly, gridded and by model species model-ready files
- **3 steps are required:**
  - Temporal allocation
    - To turn annual emissions into hourly emissions
  - Speciation
    - To split the 7 CAC species into the 20 model species
  - Spatial allocation
    - To distribute the province-wide emissions total into the correct regions

# Systeme de traitement des émissions

- Par exemple, on a dans l'inventaire:
    - La quantité de  $\text{NO}_x$  ( $\text{NO} + \text{NO}_2$ ) émise par les tondeuses à gazon au Québec pour toute l'année 2000.
  - Mais pour nos modèles, on veut:
    - La quantité de  $\text{NO}$  émise par les tondeuses à gazon dans la cellule de notre grille couvrant l'Est de Montréal le 12 juillet entre 13h et 14h.
- Et on refait cela pour chaque cellule, chaque heure et chaque polluant et chaque processus d'émission...

## Spatial allocation of emissions (1)

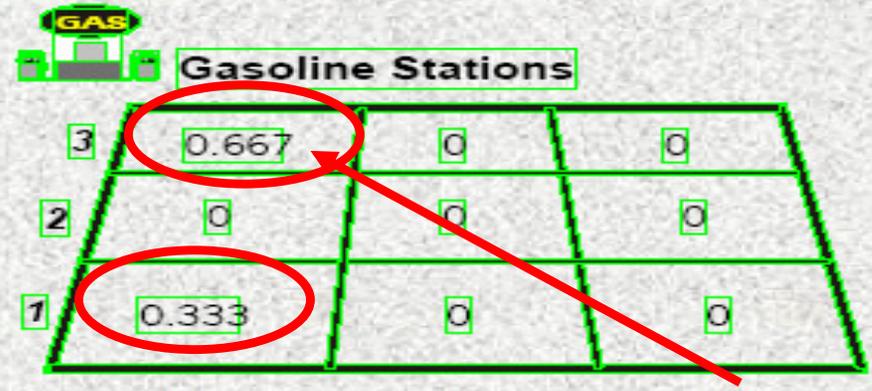
A modelling domain usually contains different sources and processes that are unevenly spread across the domain.



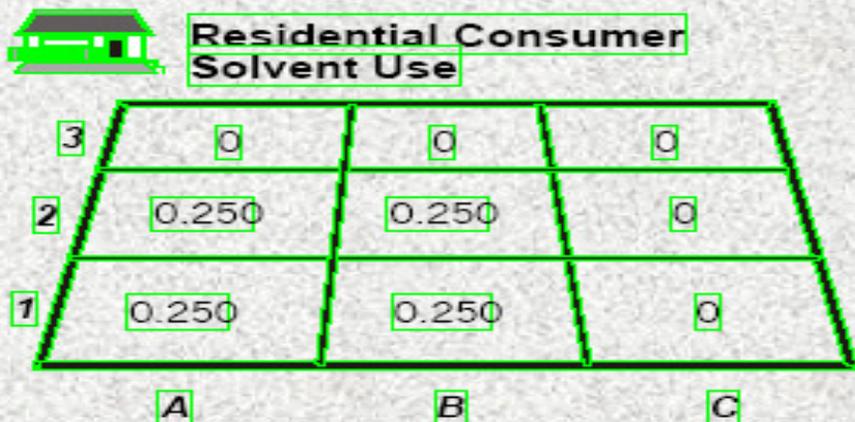


## Spatial allocation of emissions (3)

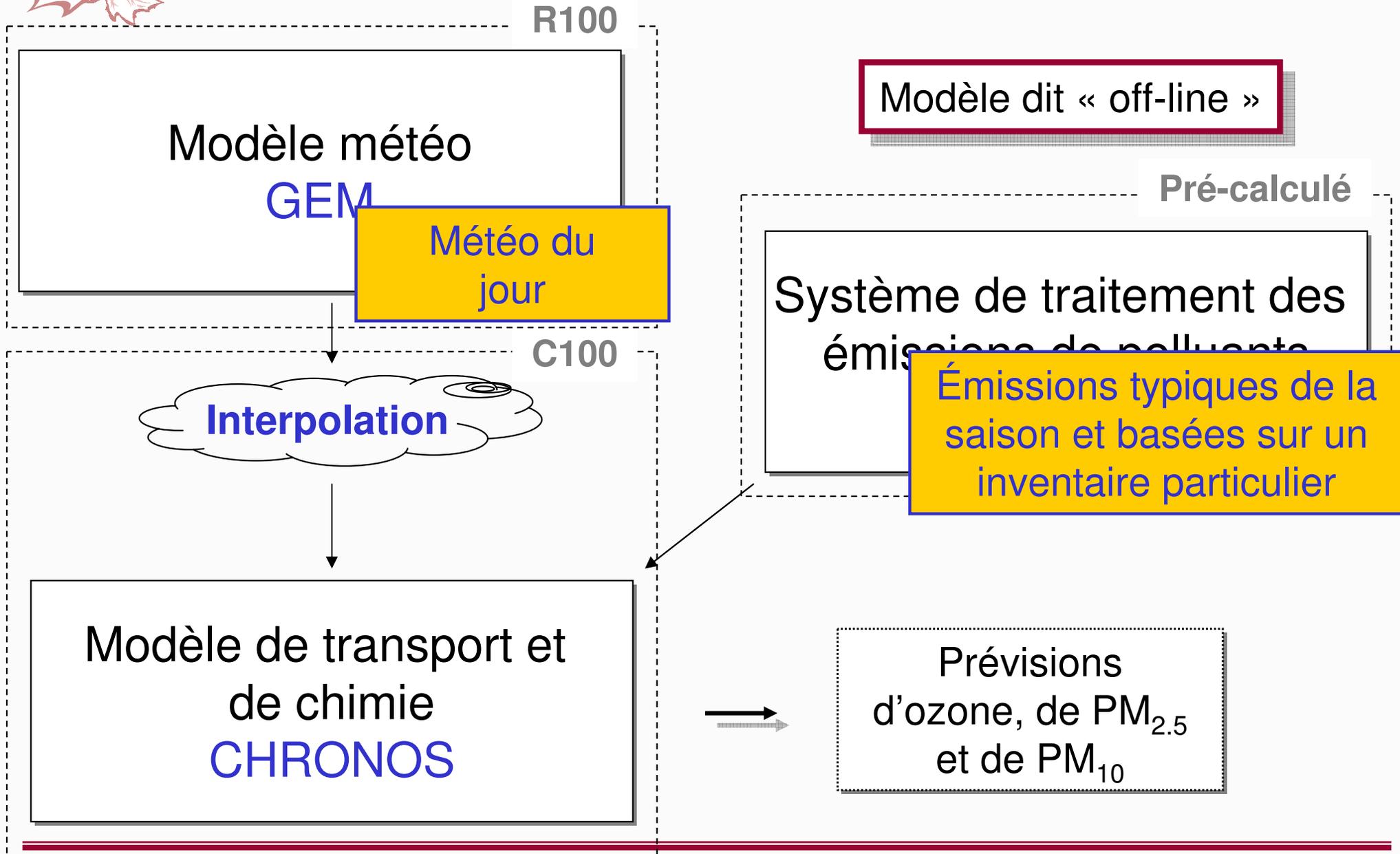
The ratios calculated for each grid cell are the so-called « spatial surrogates ».



**2/3 of gas station emissions go here.  
The rest goes in bottom-left cell**



# Systeme de prévision de la qualité de l'air du CMC



## A propos d'AURAMS...

- AURAMS (A Unified Regional Air Quality Modelling System) est le petit (grand?) frère de CHRONOS.
- Le développement s'est orienté vers la construction d'un **modèle unifié de chimie atmosphérique** plutôt que vers la prévision.
- AURAMS contient donc un jeu **plus complet** et plus **sophistiqué** de processus chimiques mais est aussi **beaucoup plus lent et lourd** à exécuter.

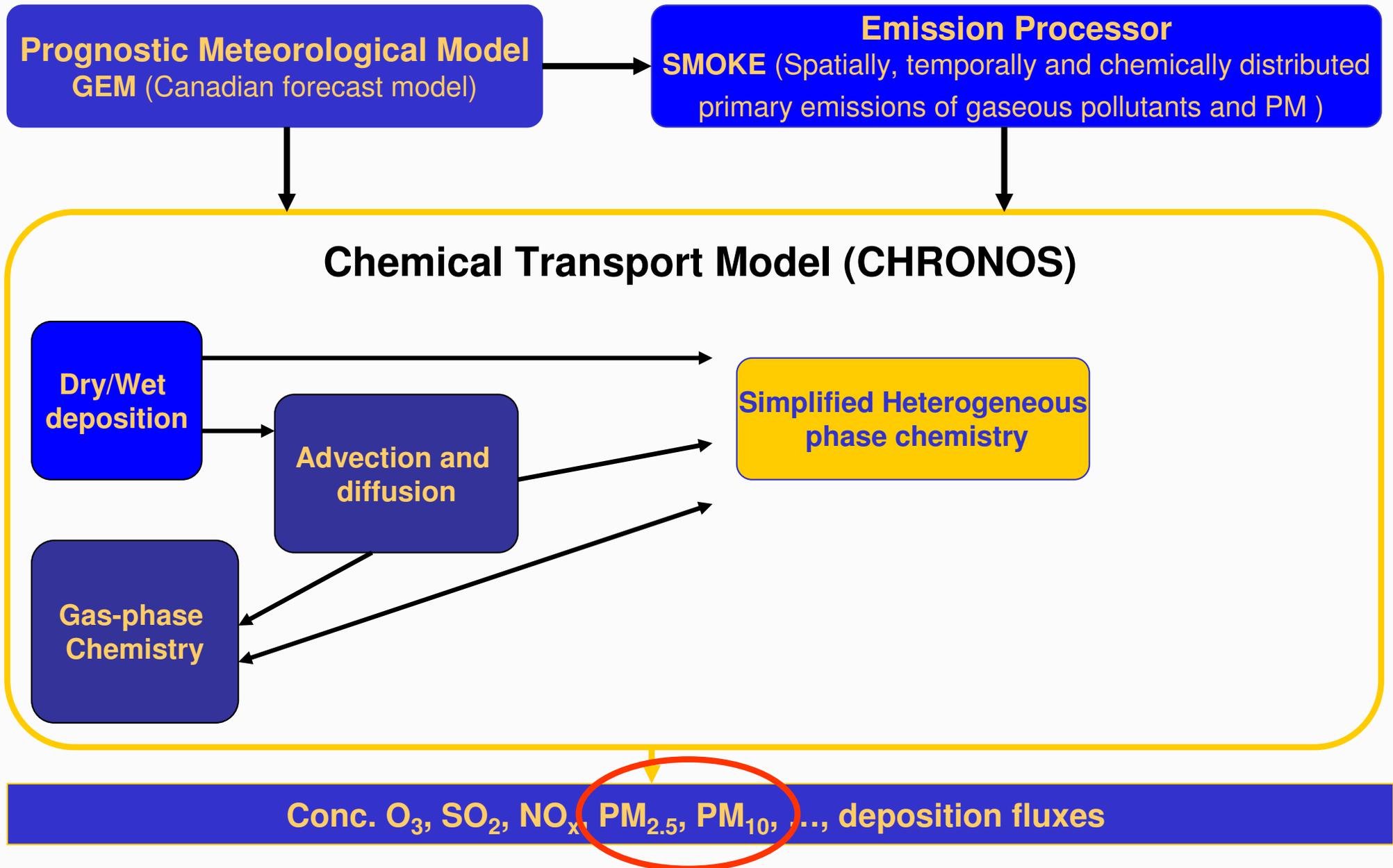


# Differences between the AQ models

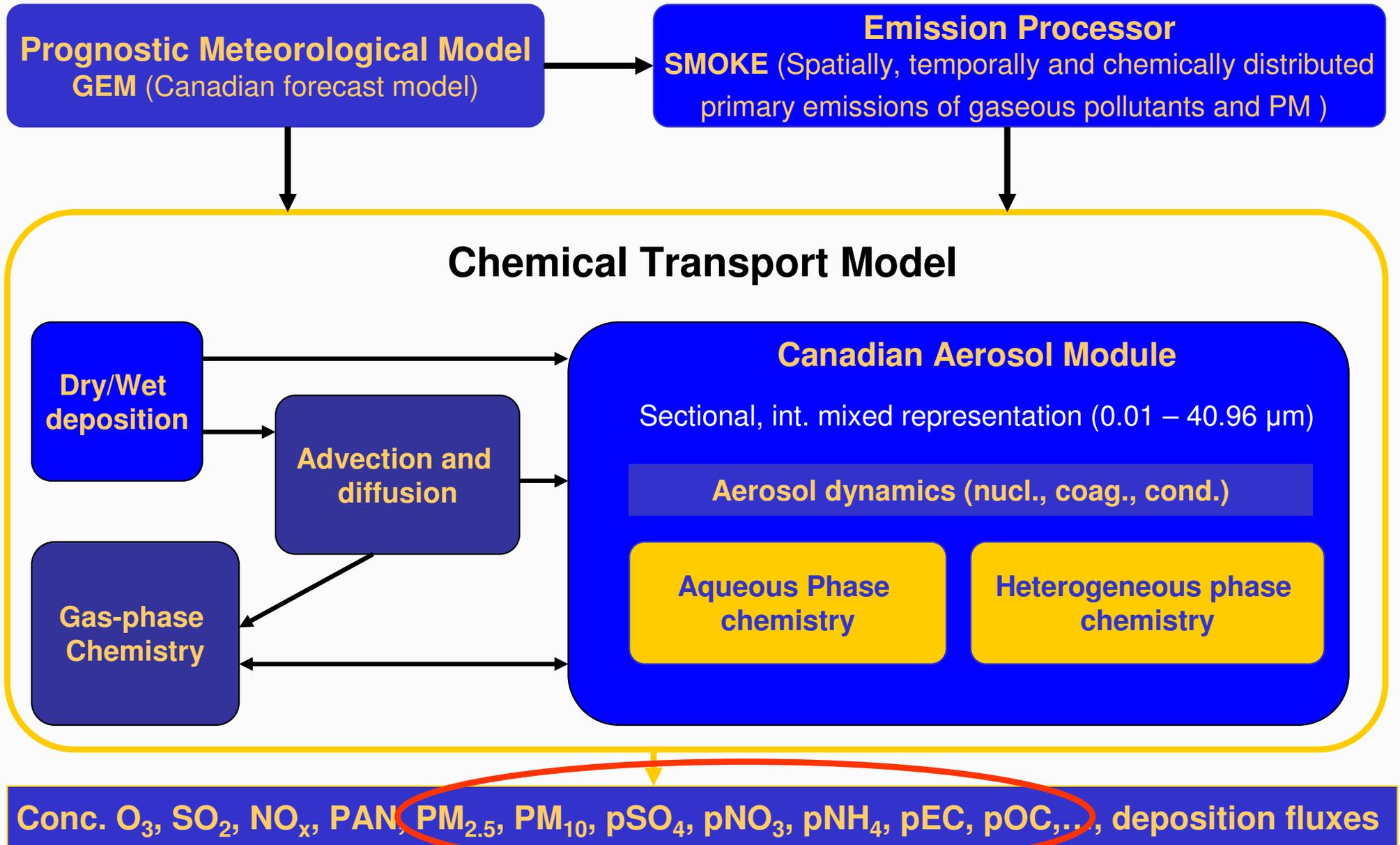
	AURAMS	CHRONOS
Meteorological driver	GEM	
Emissions data	2000 Canadian and 2001 U.S. inventories	
PM representation	Sectional method	
	12 bins	2 bins
Chemistry	Gas-phase, aqueous-phase and heterogeneous	Gas-Phase and heterogeneous
Aerosol physics	6 processes	Sedimentation only
Applications	Policy guidance & Real-time	Real-time forecasting & RT policy appl.



# Le fonctionnement de CHRONOS plus en détail...

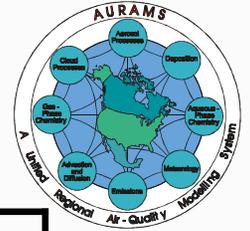


# AURAMS plus en détail...





# Performances d'AURAMS/CHRONOS



	<b>Grid</b>	<b>Timestep</b>	<b>TIME</b> (on IBM, 1 node, 8 CPUs)
<b>AURAMS EAST</b> (42 km res)	85x105x28	900s	2h30 / 24h
<b>AURAMS WEST</b> (21 km res)	148x124x28	900s	6h / 24h
<b>AURAMS CONT</b> (42 km res)	155x101x28	900s	4h30 / 24h
<b>CHRONOS CONT</b> (21 km res)	350x250x24	1h	2h45 / 48h

**CHRONOS est environ 4X plus rapide qu'AURAMS**

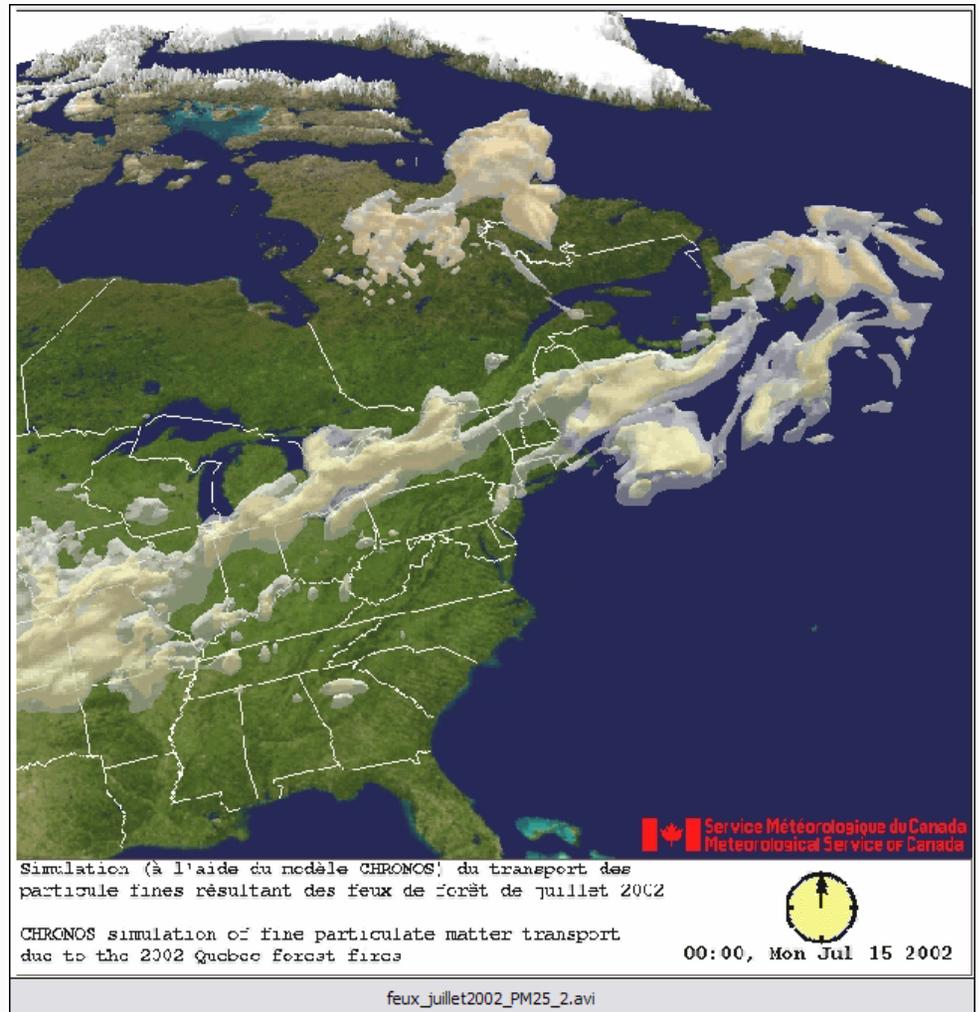
## Autres utilisations de CHRONOS

- Recherche et développement
- Scénarios de réduction de pollution en temps réel
- Support aux campagnes de mesure

### A droite:

Simulation du panache de particules fines de moins de 2.5 microns causé par les feux de forêts dans le nord du Québec au début de juillet 2002.

Source: Région du Québec (Rousseau, Morneau) et David Lavoué, ARQI

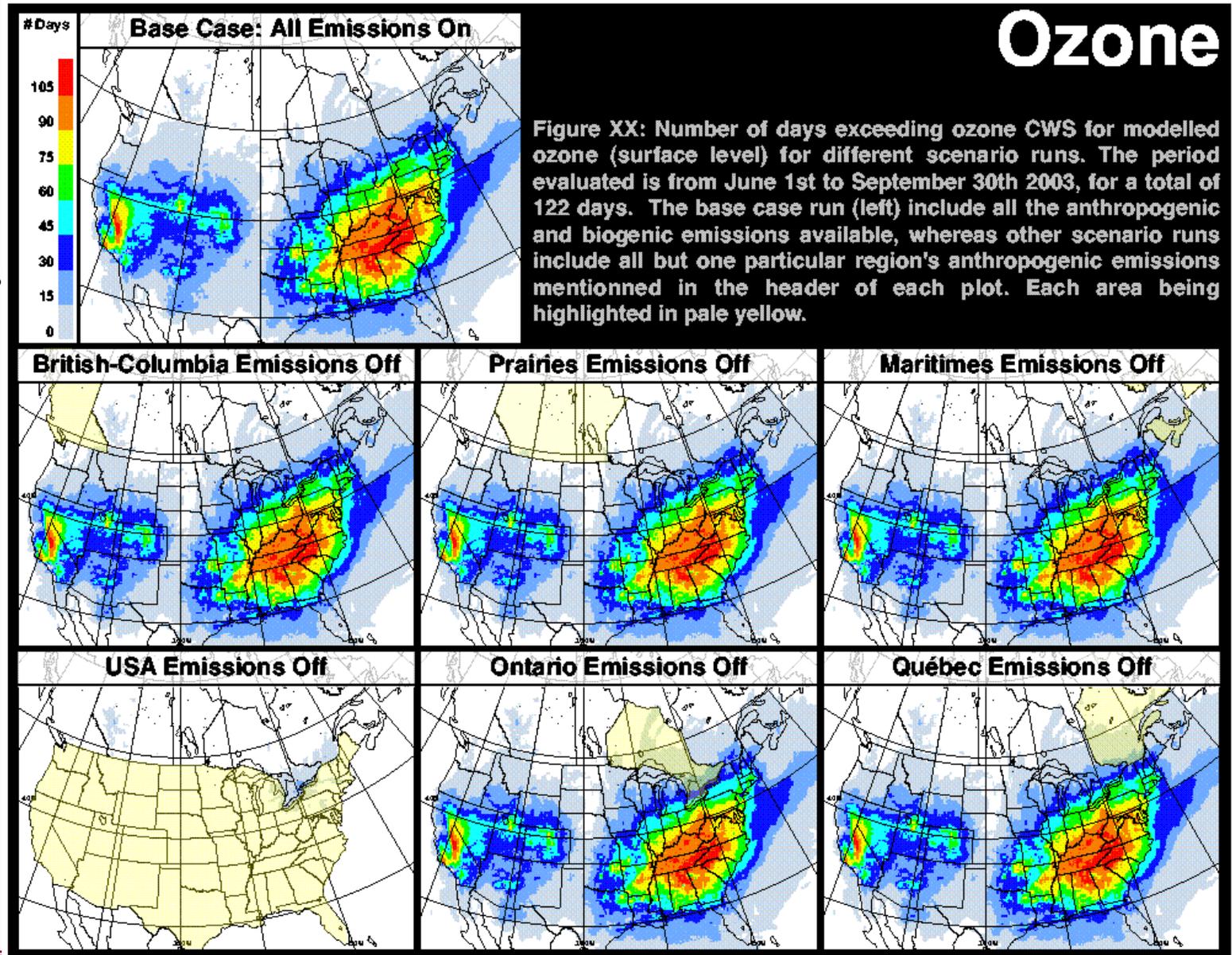




# Real-time policy CHRONOS runs

7 daily runs of CHRONOS with different emissions fields input

The yellow sections in the image show the regions where the emissions are turned for each run



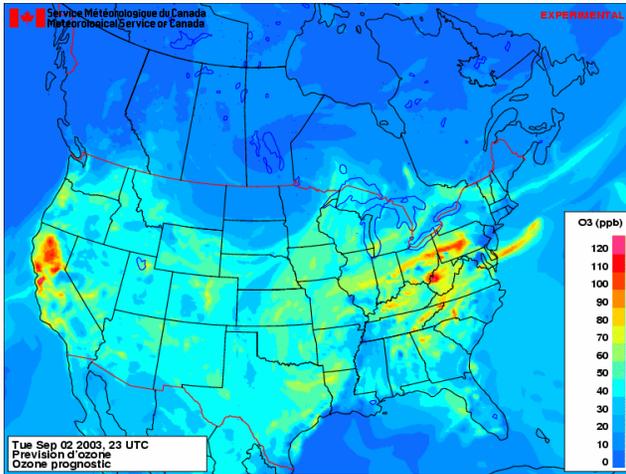
## Support à ICARTT et PrAIRie 2005

- Produits spécialisés en support à ces deux campagnes de mesure
  - e.g. animations de sorties supplémentaires, sorties en fichiers standards, vérifications, etc
- CHRONOS a été utilisé mais des prévisions d'AURAMS étaient nécessaires pour obtenir le niveau de détail voulu au niveau des variétés d'espèces chimiques.
  - Ceci imposait des délais importants aux produits livrés.
  - Pour PrAIRie, il a fallu le support de CMOI pour livrer en temps.
  - Pour ICARTT, on a tout simplement pas dormi...



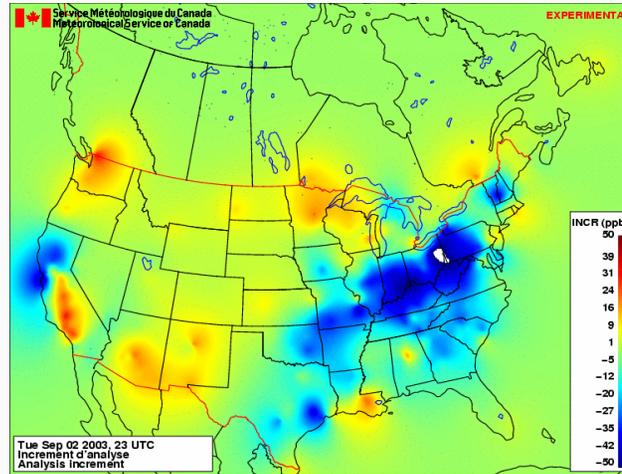
# Analyse objective de l'ozone

## CHRONOS trial



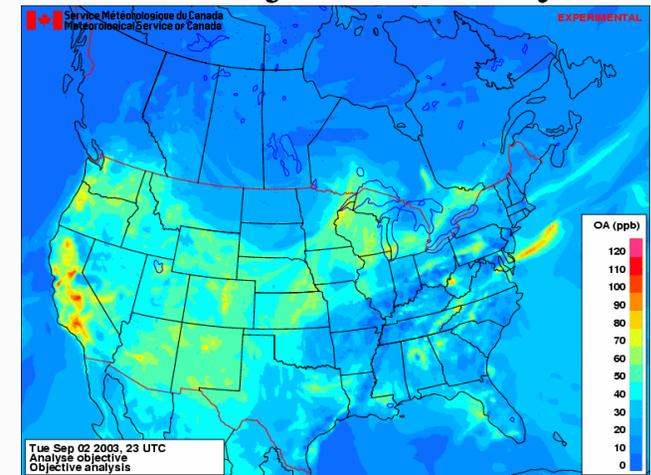
+

## Analysis increment



## Ozone objective analysis

=



- Basée sur les données d'ozone disponibles sur AIRNOW.
- Au niveau du sol seulement.
- Disponible à chaque heure

Disponible au public depuis l'été 2004

*Travail de Richard Ménard et Alain Robichaud*

## **Quels sont les problèmes auxquels nous devons faire face avec CHRONOS?**

- **Le code actuel n'est pas MPI**
  - OpenMP seulement donc limité à un seul nœud sur azur.
  - Le modèle prend actuellement plus de 2h à compléter une prévision de 48h. Ce temps devrait être réduit sous les 2 heures.
- **Nous sommes limités dans le choix des améliorations qui peuvent être apportées au modèle**
  - Les améliorations ne doivent pas ajouter de coût informatique.

## **Quels sont les problèmes auxquels nous devons faire face avec CHRONOS?**

- **Équipe scientifique**

- Au cours des ans, les ressources allouées au développement de CHRONOS ont été relativement limitées. A la fin de 2004, seul Richard Moffet travaillait sur CHRONOS.
- Il y a un besoin de rebâtir une équipe scientifique solide autour de la prévision de la qualité de l'air de façon à fournir des outils de modélisation plus performants et innovateurs.

## **Quels sont les problèmes auxquels nous devons faire face avec CHRONOS?**

- L'interpolation des champs météo peut causer certains problèmes pour le module chimique
- Quantité d'information à échanger
  - La quantité d'information météorologique nécessaire aux processus d'AURAMS est grandement supérieure à celle de CHRONOS.
  - Le transfert de technologie entre les deux modèles et le développement de nouvelles capacités est limité par la quantité d'information à échanger.

## **Quels sont les problèmes auxquels nous devons faire face avec CHRONOS?**

- La configuration actuelle se prête mal à l'assimilation de données chimiques.
- Les performances du système actuel limitent son utilisation sous différents configurations intéressantes
  - Modélisation hémisphérique et globale
  - Grilles à plus haute résolution

## Que font les autres?

- D'ici 2007, NOAA/NWS devrait avoir implanté un modèle de prévision d'ozone à l'échelle continentale. L'ajout de la prévision des particule fines est prévu pour 2008. La résolution visée est de 12 km.
- Cet été, A&P a participé à l'évaluation du modèle de NOAA sur l'est des États-Unis de même que sur le domaine continental expérimental. NOAA accélère le pas...
- Aussi, les projets de « chemical weather » commencent à se multiplier à travers le monde.

## En résumé...

- Le problème est que CHRONOS répond au besoins actuels de prévision mais ne pourra pas évoluer adéquatement, dans sa forme actuelle, pour répondre aux besoins de demain.
- Il faut commencer le développement aujourd'hui d'une plate-forme de modélisation de la qualité de l'air qui puisse permettre d'évoluer et de rencontrer les défis futurs.

## La solution envisagée

- **Objectif**

- D'ici **l'automne 2007**, **remplacer** CHRONOS par un nouveau modèle de prévision de la qualité de l'air basé sur **GEM** et incluant un module de chimie **équivalent ou supérieur** à celui de CHRONOS (version 2006), incluant une représentation améliorée des particules fines.

- Approche à long terme utilisée:

- Un projet impliquant **CMC (Dev, Ops), AQRB et MRB**
- Une première phase pour « simplement » remplacer CHRONOS
- Ouvrira la porte à de nouvelles collaborations et recherches

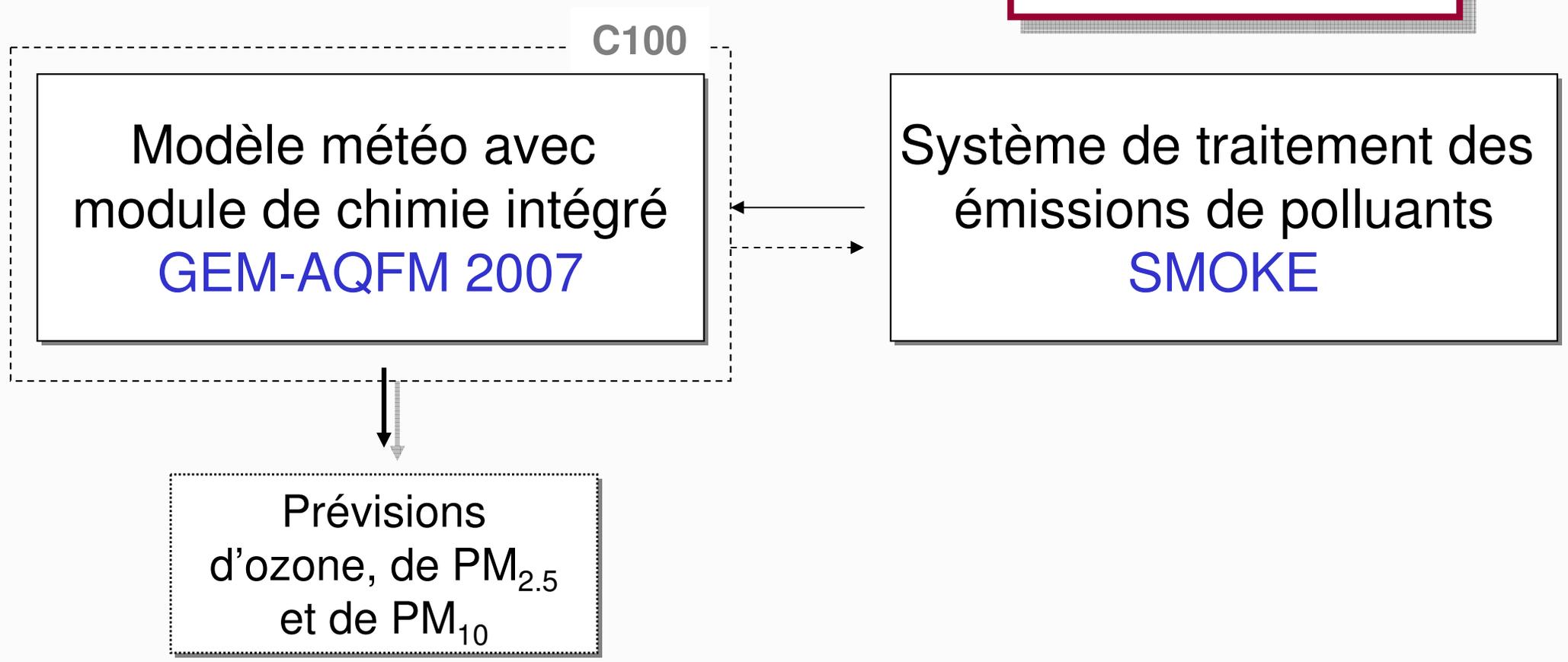
## **La solution envisagée**

- **Ce projet a été présenté aux directeurs**
  - de la recherche en qualité de l'air (Keith Puckett)
  - de la recherche en météorologie (Gilbert Brunet)
  - des opérations (Michel Jean)
  - du développement (Louis Lefavre)
  - ainsi qu'au chefs impliqués directement
- **Le projet a été approuvé.**
  - Nous sommes présentement à l'«OPP-ifier».



# Systeme de modélisation de la qualité de l'air du CMC à la fin du projet

Modèle dit « online »



## **Livrables**

- **Main project deliverables:**

- **Spring 2006:** An operational version of CHRONOS that contains a small set of improvements with respect to the 2005 version

- **2007:** An operational model based on GEM that includes a level of science equivalent to that of CHRONOS, at a minimum.

- **Measure of success:**

- Success for both deliverables will be measured by acceptance of each by CPOP after an appropriate parallel run.

## **En attendant 2007...**

- **La version courante de CHRONOS sera améliorée une “dernière” fois pour le printemps 2006.**
  - Exemples d'améliorations:
    - Optimisation du code (gains de 10-15%)
    - Revue des champs d'émissions (inventaires plus récents et/ou plus représentatifs de la situation actuelle)
    - Revue des champs météo utilisés (amélioration de la procédure d'interpolation)
  - Richard Moffet coordonne ce travail avec Mike Moran
- **Après l'implantation de cette version, le développement de CHRONOS sera gelé.**

## Où en sommes nous aujourd'hui?

- **Développements externes**

- GEM-AQ a été développé à l'université York sous l'égide de MAQNet (réseau CFCAS).
- Ce projet a démontré la viabilité d'une approche « on-line » dans GEM.
- Deux problèmes techniques:
  - Certains modules essentiels sont cependant manquants de GEM-AQ (*e.g.* chimie en phase aqueuse et chimie hétérogène)
  - L'interface développée ne rencontre pas les standards RPN pour être incluse directement dans GEM.

## Où en sommes nous aujourd'hui?

- **Développements techniques**

- Une première version d'une interface de chimie dans GEM a été complétée et est maintenant en test.

- Le travail sur l'interface chimique a permis d'identifier le besoin de construire une interface générale pour la lecture des champs d'émissions

- L'exploration initiale a commencé pour ce qui est de l'adaptation de SMOKE, des scripts et outils courants et pour la génération des champs géophysiques.

# Initialisation de l'interface de chimie

L'interface de chimie se  
« cache » sous l'interface  
de physique

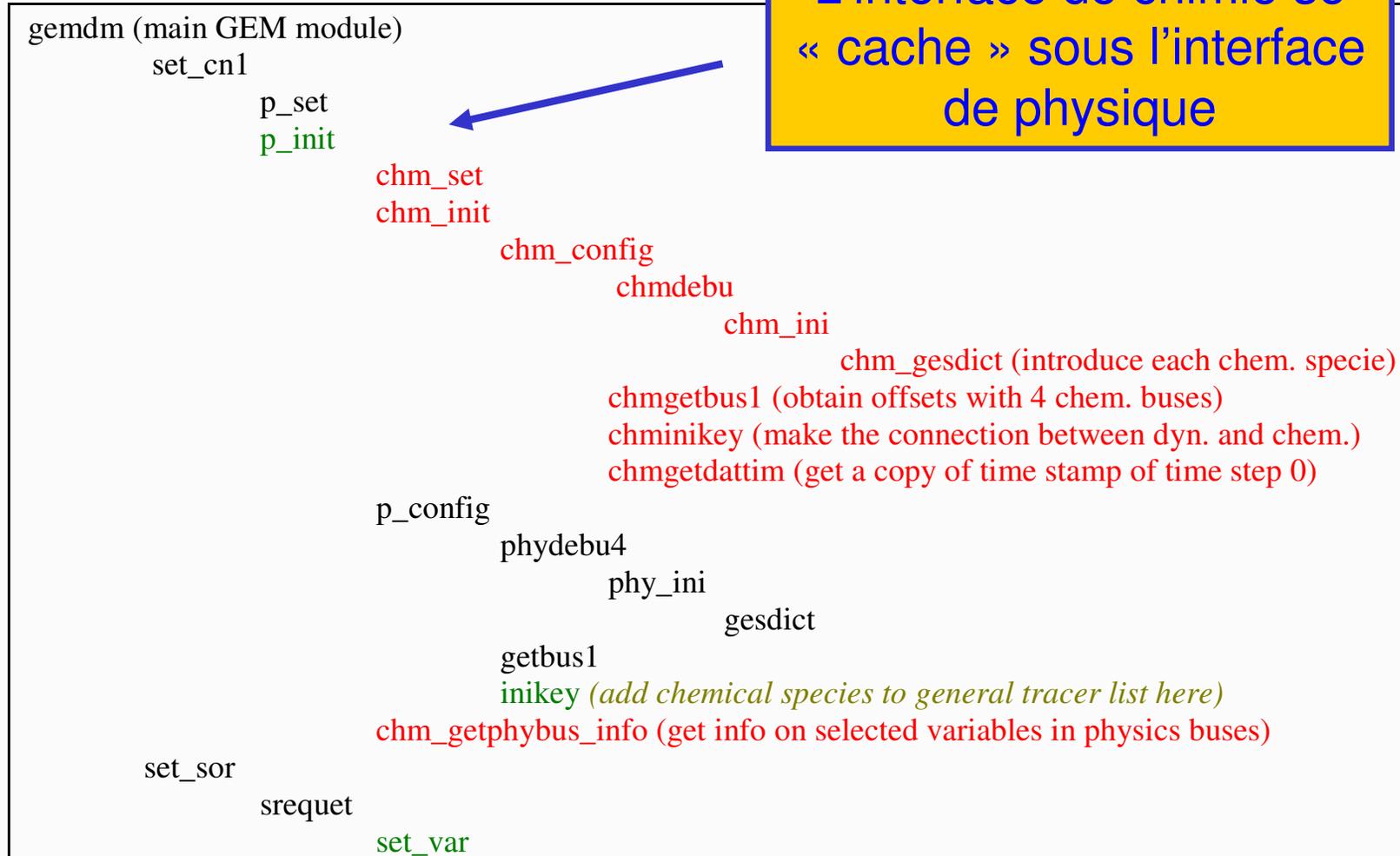


Figure 1. Subroutine calling sequence at initialization phase of GEM. Legend: **Red:** newly added subroutines for chemical interface, **green:** modified existing GEM subroutine, **black:** untouched.

# Boucle temporelle de la chimie

```
p_main
  p_phystep
    iniobus
    chm_iniobus
    p_vmmmprep
    chm_vmmmprep
    p_physlb
      p_fillbus
      chm_fillbus      (generic call to fill temp. 2d slab chem. Buses)
      p_phyexe
      chemexe(generic interface call for all chemical schemes)
      chm_apply      (generic call to return slab data to main 3D memory)
      chm_fillobus   (generic call to fill output bus)
    out_phy (Perform output for physics realated variables)
    out_chm (perform the output for chemistry related variables)
```

Figure 2 Subroutine calling sequence at actual interface. Color coding same as for figure 1 above.

- La chimie est une librairie à part de la physique mais a accès à tous les mêmes bus que la physique.
- Toute la chimie travaille en colonnes, comme la physique.

# Plan de travail vers le nouveau modèle

- **Plan de travail**

- **Préliminaires**

- Interface chimique
- Tests sur l'intégration avec SMOKE et pour l'interface d'émissions
- Commencer à porter l'interface d'AURAMS vers la façon de faire de GEM (principalement les champs géophysiques)

- **Grandes étapes de développement**

- Familiarisation avec GEM, outils RPN, etc
- Préparation des grilles, champs géophysiques, émissions pour les cas de développement. Développer/raffiner les méthodes.
- Développement d'une interface (généralisée) pour les émissions
- Inclusion en étape des modules de chimie dans la librairie chimique

- **Préparation à une passe parallèle**

- **Passe parallèle et implantation**

## Développement d'une interface pour les émissions

- Les champs d'émissions varient dans le temps et doivent être lu par GEM au moment approprié.
  - Penser « champs géophysiques qui varient dans le temps »
- En plus, des champs 3D d'émissions pourront avoir à être lus.
  - e.g. émissions de hautes cheminées d'usines
- GEM ne possède pas de mécanisme pour cela et ce mécanisme devra être distinct de l'interface de chimie (1-D). Nous devons en développer un.

## **Ajout des modules de chimie à la librairie**

- Les différents modules de chimie de CHRONOS et/ou AURAMS seront intégrés par étape à la nouvelle librairie de chimie.
- A chaque étape, une série de tests seront effectués avant de passer à l'étape suivante.
  - Les tests seront effectués par une équipe de « testeurs » dédiée.
  - Les tests seront cumulatifs d'une étape à l'autre.
- Le travail de configuration pour une passe parallèle éventuelle pourra débuter lorsque le niveau de science aura atteint celui de CHRONOS 2006.

## Plan de travail – Passe parallèle

3	<b>Parallel run preparation</b>
3.1	Preparation of operational configuration
3.2	Regional testing
3.3	Model ready for parallel run
4	<b>Parallel Runs</b>
4.1	CPOP proposal preparation
4.2	CPOP proposal presentation

- **Processus CPOP normal**

- Les cycles de développement devront prouver un bénéfice avant l'approbation de la passe parallèle.

- Risque: cette contrainte pourra allonger la tâche de préparation à la passe parallèle

- À noter: nous voulons inclure une participation accrue des régions dans l'évaluation pré-parallèle ainsi que pendant la passe parallèle.



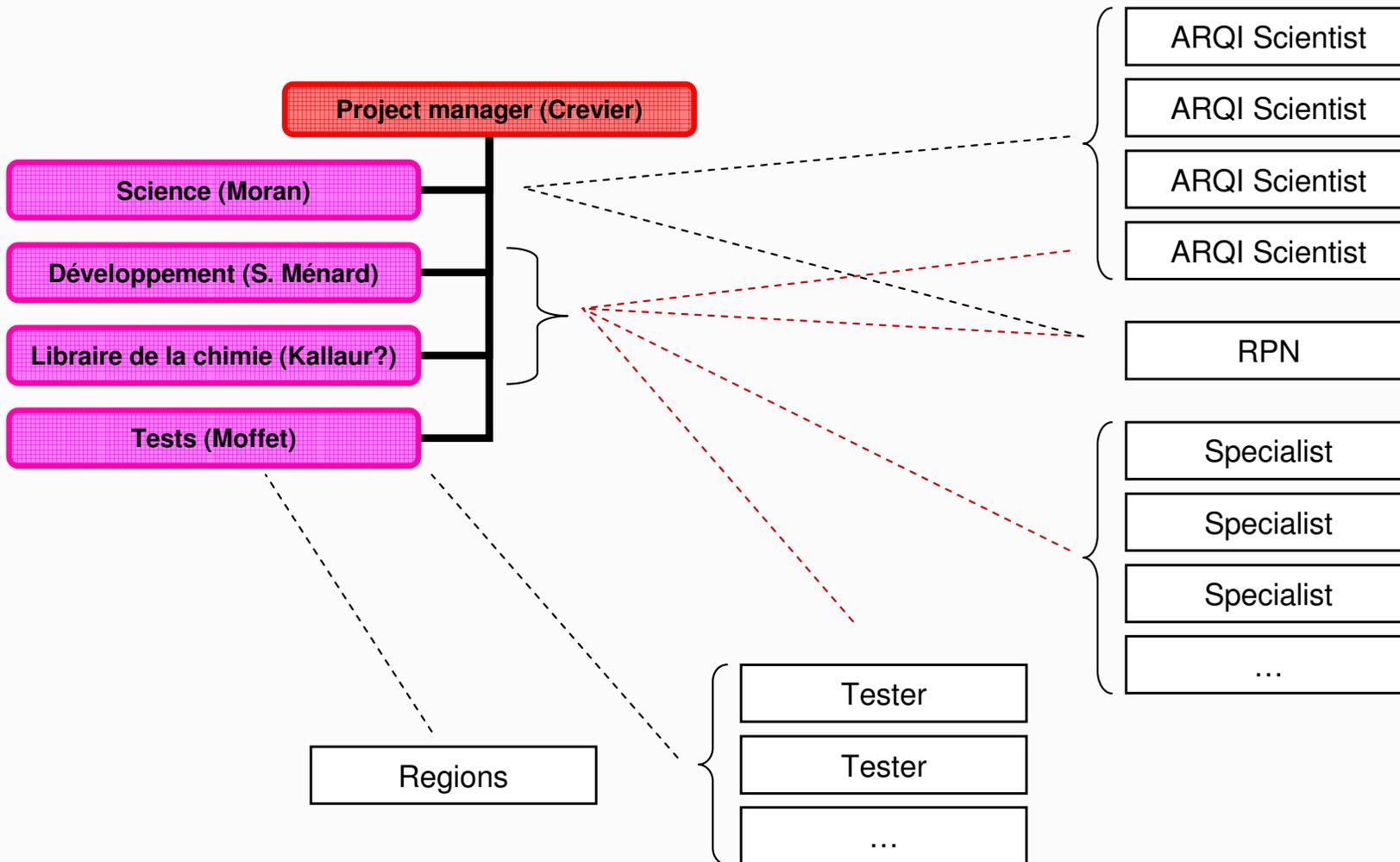
# Échéancier global

Tâche	2005	2006				2007			
	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
Développement									
<i>Formation</i>	●—————▶								
<i>Préparation</i>	●—————▶								
<i>Modifications à SMOKE</i>	●—————▶								
<i>Interface d'émissions</i>	●—————▶								
<i>Librairie chimique</i>	●—————▶								
Configuration, validation				●—————▶					
Passe parallèle								●—————▶	

# Structure du projet

Équipe de coordination

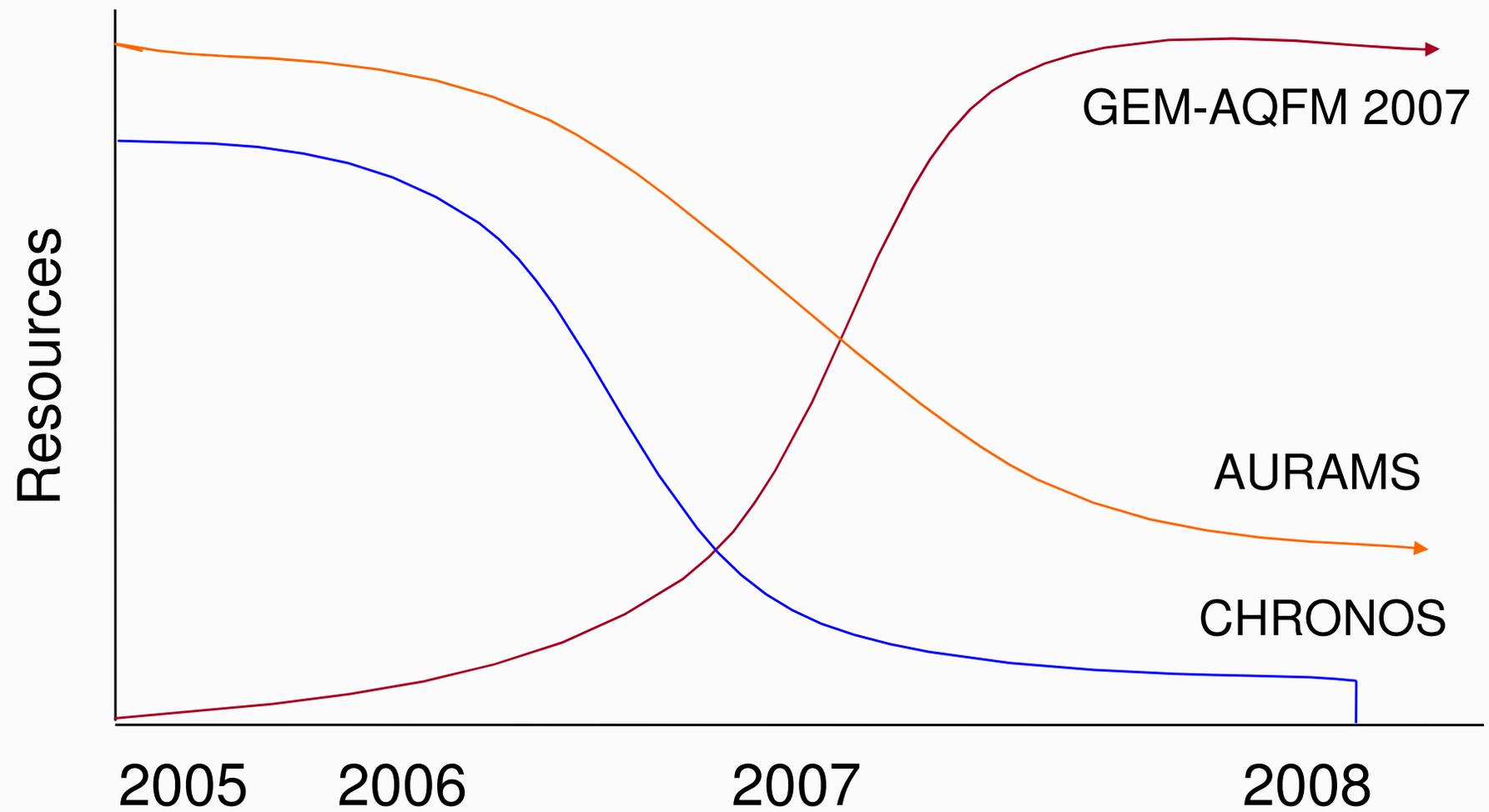
« Scientists / Specialists » contribuent selon les modules ou expertises nécessaires à un moment donné.





# Liens avec d'autres modèles de chimie

- AURAMS**



## **Liens avec d'autres modèles de chimie**

- **Projet ESA (Richard Ménard)**

La première version de l'interface chimique a été créée dans le cadre de ce projet.

- **GRAHM (Ashu Dastoor)**

Didier Davignon contribuera au travail d'interface d'émissions dans GEM afin de s'assurer qu'elle soit la plus générale possible.

- **Modèle unifié des POPS (Ashu Dastoor, Sunling Gong)**

Un effort similaire au nôtre est en voie de démarrer pour unifier les modèles de recherche sur les Polluants Organiques Persistants

## **Liens avec d'autres modèles de chimie**

- **GEM-AQ**

- Le projet CFCAS pour GEM-AQ tire à sa fin.
- Des discussions avec York ont eu lieu au cours de la préparation de ce plan de travail pour évaluer les collaborations et échanges possibles.
- Le contexte opérationnel de ce projet-ci limite cependant les choix scientifiques qui pourront être fait.

## Liens à long terme avec le reste de CMC/MRB

- **Améliorations à l'advection dans GEM**

La chimie a besoin d'advection qui conserve la masse

- **Revue / Amélioration des champs géophysiques**

Les processus chimiques actuellement utilisés des bases de données différentes de celles de GenGeo et Genesis

Le traitement des d'émissions utilise une foule d'outils (GIS et autres) et de bases de données qui peuvent être utiles pour d'autres projets/modèles

- **Meilleure collaboration sur les aspects météo (couche limite, etc)**

Les modèles de qualité de l'air, par leur besoins spécifiques de variables obscures, font ressortir périodiquement des faiblesses du modèle météo.

L'utilisation d'une plate-forme de modélisation commune augmentera les échanges entre les deux communautés.

- **Recherches sur l'intégration progressive de « 2-way coupling »**

Avec ce genre de plate-forme, la porte est ouverte à la modification de la météo par les champs de polluants (e.g. effets sur la radiation)

## Résumé

- Un nouveau modèle de prévision de la qualité de l'air verra le jour d'ici 2007.
- Ce modèle sera basé sur GEM auquel seront ajoutés:
  - une librairie chimique de niveau équivalent ou supérieur à celle de CHRONOS
  - et une interface permettant de lire les fichiers les fichiers d'émissions de polluants.
- Ce modèle remplacera CHRONOS aux opérations après une évaluation en bonne et due forme selon les critères de CPOP.

## **Pour plus d'info...**

- Pour en savoir plus et pour suivre l'évolution du projet, vous pouvez consulter notre wiki à

<http://aq.cmc.ec.gc.ca>

**Merci!**