

地球系统数值模拟装置
不确定分析子系统
使用培训

2022年5月17日



课程内容

1 / 不确定分析子系统情况介绍

- 系统概述和构成
- 系统接口和流程

2 / 不确定分析子系统环境的使用

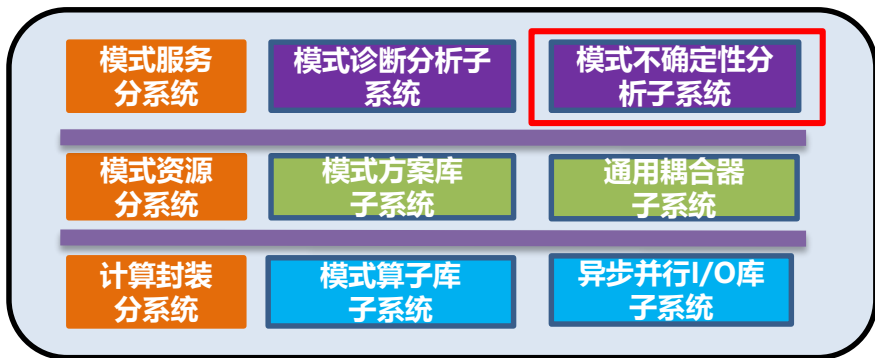
- 系统环境部署及初始配置

3 / 不确定分析子系统功能的使用

- 功能基本介绍、使用及演示

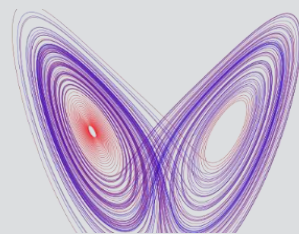
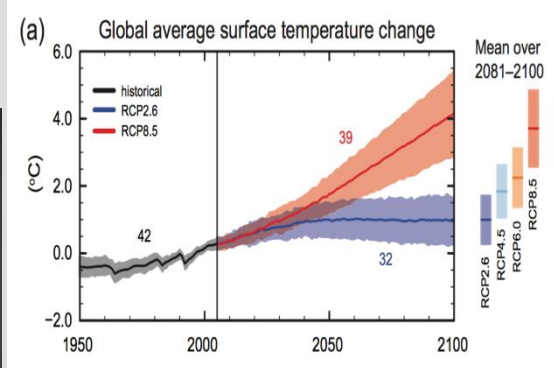
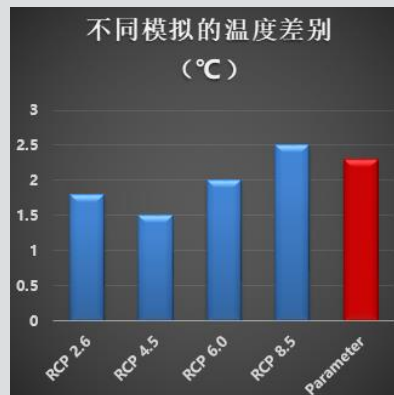
4 / 交流讨论

1.1 系统概述



参数调优是模式发展中最为繁琐且不可或缺的环节，参数调优旨在参数空间内找到一组最优化参数，使得模式模拟结果与真实的观测更为接近，降低物理参数化方案中参数带来的不确定性。

地球系统模式存在非常严重的不确定性，且造成模式不确定性的因素复杂多样，模式结构、初值、边界条件和物理参数化方案均是模式结果不确定性的来源



Edward N. Lorenz et al., 1963

在每种排放场景下，不同模式之间均存在较大偏差 (IPCC AR5)

1.1 系统概述

不确定性与
敏感性分析

参数估计

集合设计

陆面模式优化

碳氮循环分析
与优化

计算调度优化

1.物理方案参数
采样分析模块

2.物理
方案参数
局部敏
感性分
析模块

3.物理
方案参数
全局敏
感性分
析模块

4.物理方案参数
不确定性量化分
析模块

5.模式初值集合
模块

7.物理方案参数
优化的评价函数
辅助设计模块

8.物理方案参数
筛选模块

9.局
部优
化算
法模
块

10.全
局优
化算
法模
块

12.物理方案快
速检测平台

6.模式物理倾向
随机扰动模块

11.代
理模
式模
块

13.陆面模式多物理参数
优化方案和参数优选模块

14.陆面碳循环的快速启
动模块

15.陆面模式碳、氮、水
和能量循环的溯源性诊
断模块

16.陆面模式关键过程的
基准性分析模块

17.陆面模式碳循环的数
据融合模块

18.陆面模式生物地球化
学循环多源结构的比较与
优选模块

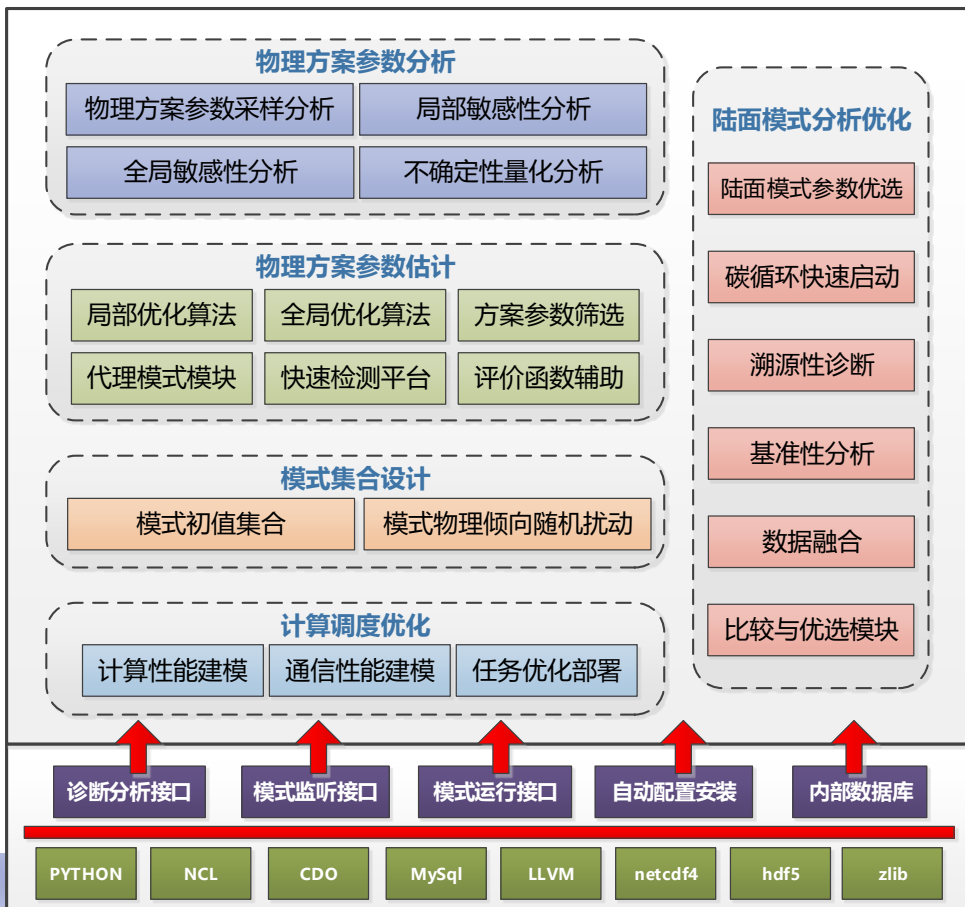
19.模式计算性
能建模模块

20.模式通信性
能建模模块

21.任务优化部
署模块

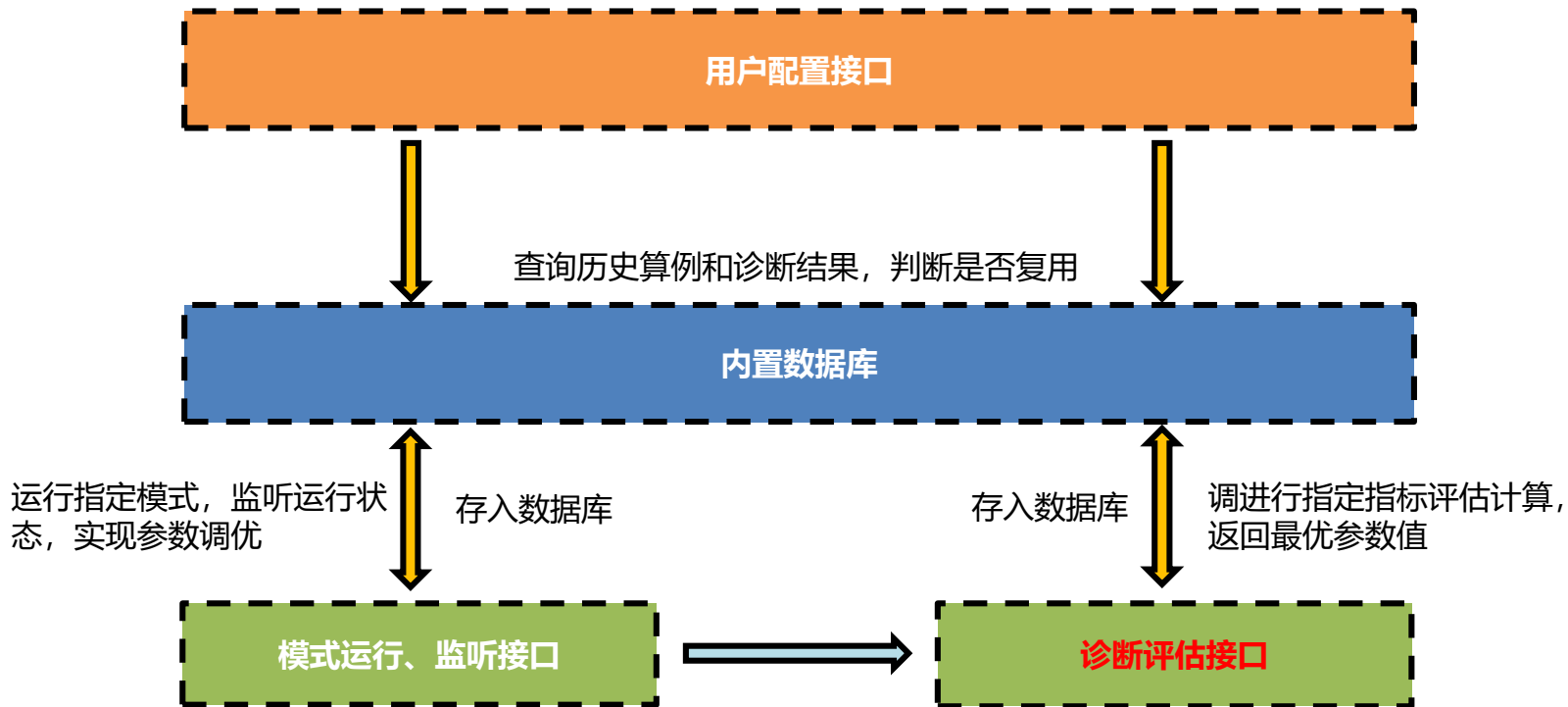
22.模
式模
拟与
观测
数据
接口
模块

1.2 系统构成

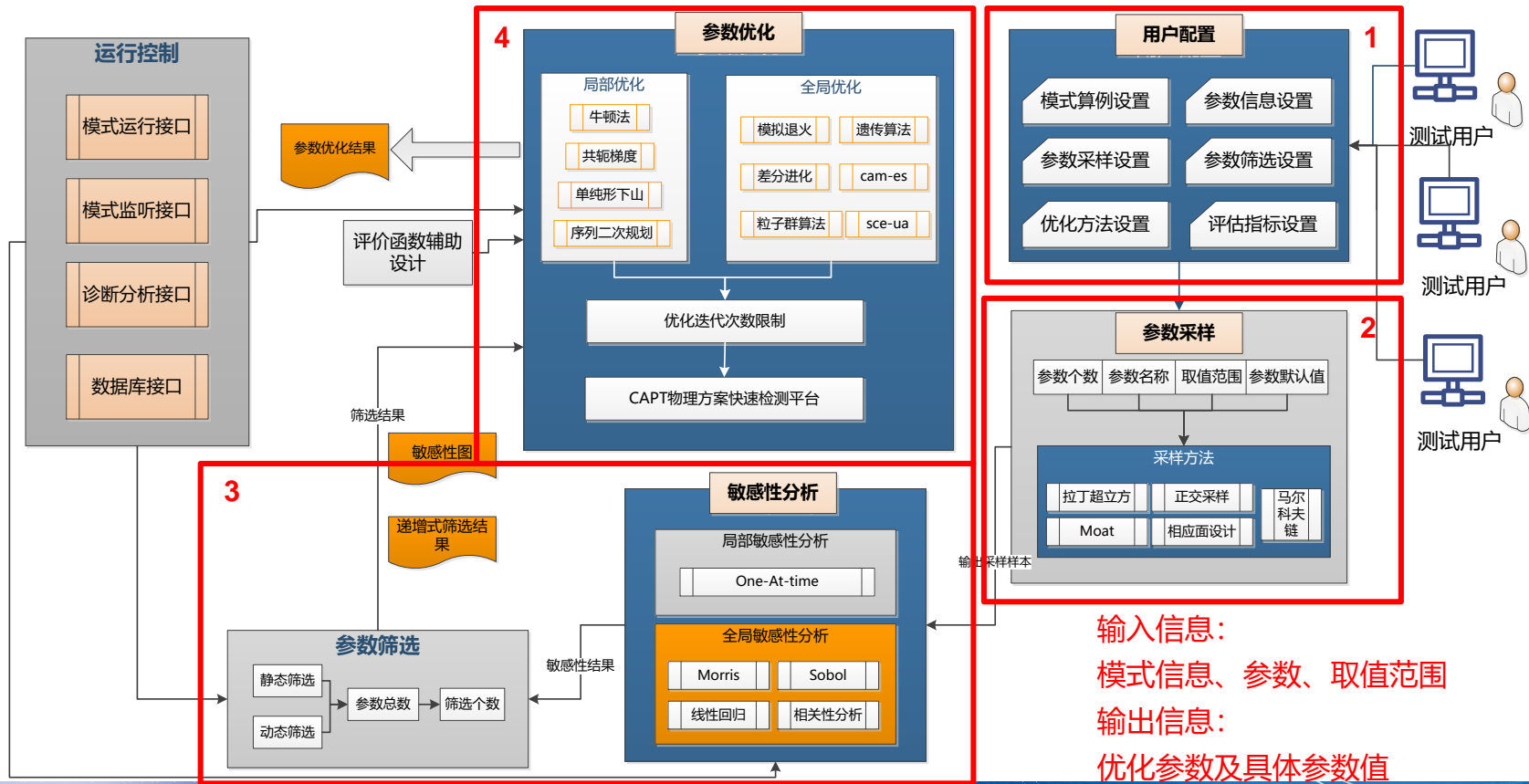


- **参数分析:** 针对多元参数可以按照不同的采样策略进行采样, 计算多元参数的 (局部、全局) 敏感性, 后验分布与参数置信区间
- **参数优化:** 利用不同的参数优化方法, 选择最优的参数方案
- **集合设计:** 支持SPPT、LAF、BGM三种扰动集合方法;
- **计算调度优化:** 根据用户指定的算例配置, 返回最优进程排布;
- **陆面模式分析:** 针对陆面模式进行, 参数优选, 快速启动, 数据融合等工作

1.3 系统接口



1.4 系统流程



2.1 系统部署环境

运行平台

Linux

开发语言

采用python开发，部分接口采用shell、ncl开发

底层软件

需要netcdf、ncl、cdo、nco、python、ncview、Mysql



模式服务

支持SCAM、CESM、CAS-ESM模式

部署环境

当前在大装置开展部署、测试、试运行工作

2.2 系统初始配置

- **步骤1:** 确认自己账号是否已安装python或anaconda3

```
(base) [wujx01@login03 ~]$ ls
anaconda3 Anaconda3-2019.10-Linux-x86_64.sh  cpuinfo  intel  perl5  software  work
```

- **步骤2:** 将uq环境包 (uq-env.tar.gz) 拷贝至\$anaconda3/envs下, 解压缩

```
(base) [wujx01@login03 ~]$ cd /public/home/wujx01/work/EARthLab_UQ
(base) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$ tar zxvf uq-env.tar.gz ~/anaconda3/envs/uq
```

- **步骤3:** 修改解压缩路径下bin中的pip和pip3文件第一行的路径

```
(base) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$ cd ~/anaconda3/envs/uq
(base) [wujx01@login03 uq]$ vim bin/pip
(base) [wujx01@login03 uq]$ vim bin/pip3
```

2.2 系统初始配置

```
#!/public/home/wujx01/anaconda3/envs/uq/bin/python3.7
# -*- coding: utf-8 -*-
import re
import sys

from pip._internal.cli.main import main

if __name__ == '__main__':
    sys.argv[0] = re.sub(r'(-script\.pyw?|\\.exe)?$', '', sys.argv[0])
    sys.exit(main())
```

修改成账号当前使用的
python存放路径 (pip
和pip3修改内容一致)

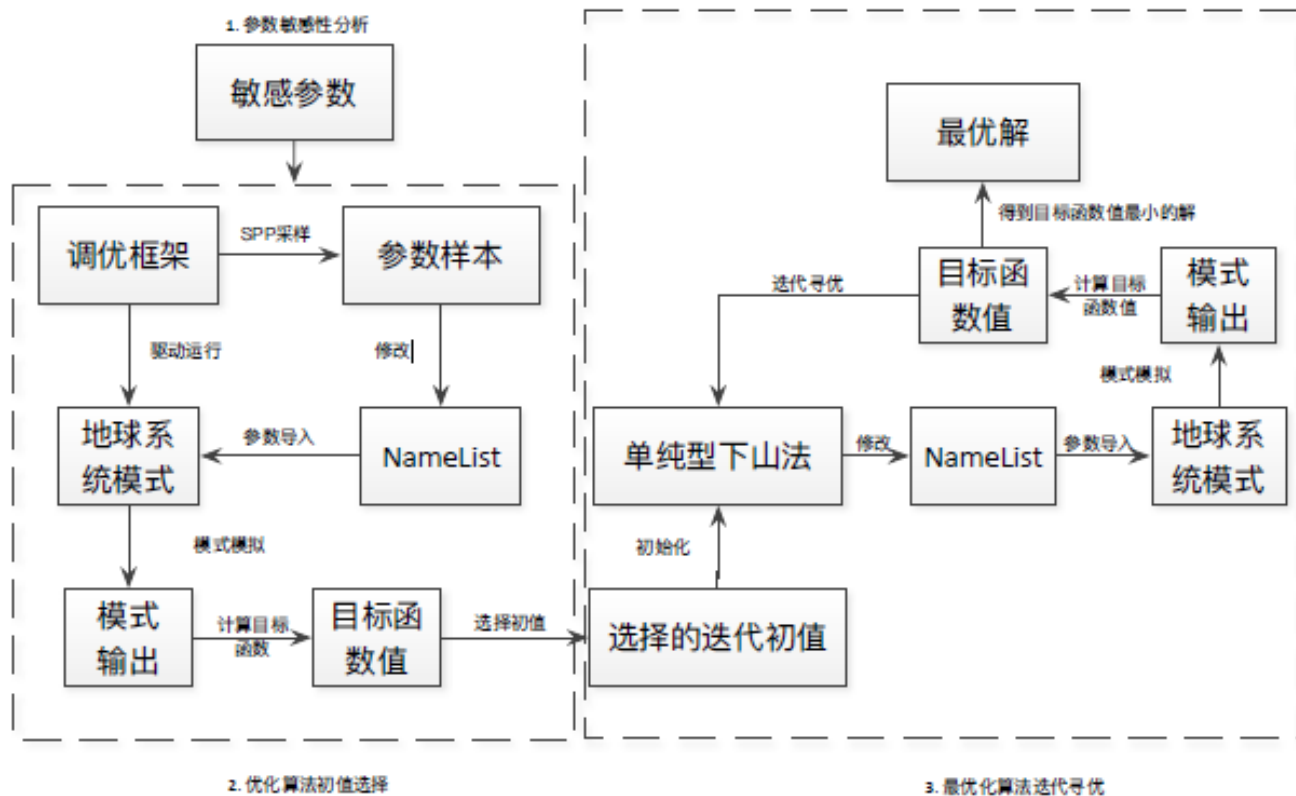
➤ **步骤4:** 执行conda activate uq激活系统环境

```
(base) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$ pwd
/public/home/wujx01/work/EARthLab_UQ
(base) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$ source activate uq
(uq) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$
```

3.1 基本功能-参数分析

模块名称	功能
物理方案参数采样分析	主要支持六种采样方法，蒙特卡罗（MC）随机采样，马尔科夫链蒙特卡罗（MCMC）采样，拉丁超立方采样，正交采样，中心混合设计采样，响应面设计采样，同时支持对采样样本进行后处理
物理方案参数局部敏感性	采用One-At-a-Time进行基准点附近的单参数和单点采样，并计算其梯度作为局部敏感性数据
物理方案参数全局敏感性	主要支持四种全局敏感性计算方法，线性回归分析、相关性分析、Sobol、Morris，同时实现与敏感性分析方法相对应的采样方法
物理方案参数不确定性量化	实现广义似然不确定估计方法，找到多元参数的置信区间，同时给出参数的后验分布图

3.2 基本功能-参数调优



- 对用户选定的参数进行采样，敏感性分析
- 敏感性排序，降维
- 通过调优函数生成新的参数
- 反复迭代
- 产生最优解

3.2 基本功能-参数调优

模块名称	功能
参数筛选	主要支持两种参数筛选方法，基于Morris敏感分析的静态筛选方法，基于Sobol敏感性分析的动态参数筛选方法
局部优化	主要支持四种局部优化算法，牛顿法（newton）、共轭梯度法、序列二次规划法、单纯形下山法（dhs）。
全局优化	主要支持六种全局优化算法，模拟退火（SA）算法、遗传（GA）算法、差分进化（DE）算法、粒子群（PSO）算法、CMA-ES算法、SCE-UA算法。
代理模式优化	主要支持六种基于采样样本构建原有模式的回归模型，逼近真实模式的统计特性。径向基函数（RBF）代理模式、克里金（Kriging）代理模式、多元自适应回归样条（MARS）代理模式、多项式回归（Poly）代理模式、支持向量回归（SVR）代理模式、基于多层感知机代理模式的优化法（ANN_CAND）

3.3 参数调优演示

➤ 步骤1: 进入系统的参数调优功能文件夹

```
(uq) [wujx01@login03 EARthLab_UQ]$ cd ParameterEvaluation_FunLayer
(uq) [wujx01@login03 ParameterEvaluation_FunLayer]$ ls
breakpoint                               module_CAPT                               output
capt_file                                module_CAPT_casesm                       ParametersEvaluation.py
config                                    module_GlobalOpt                          __pycache__
eva_interface.py                         module_GlobalSen_result                   reference_for_test
logs                                       module_LocalOpt                           run.sh
log_test1_wujx_systemIntegratedTest.2022-02-221002 module_Sampling_result                   run_system.sh
log_test1_wujx_systemIntegratedTest.2022-02-231035 module_Screen                             run_targets.sh
log_test2_wujx_systemIntegratedTest.2022-02-221322 module_SurrogateModel                    state.obj
log_test2_wujx_systemIntegratedTest.2022-02-221331 outcmaes
```

所有需要配置的信息存放位置

运行日志存放位置

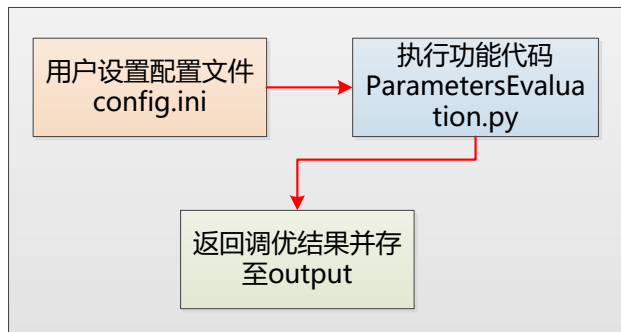
开发算法存放位置

结果存放位置

一键执行脚本

3.3 参数调优演示-用户配置接口

➤ **步骤2:** 进入config文件夹, 修改input.ini



```
1 VarName BestOptimization
2 zmconv_c0_lnd&zmconv_n1 0.00351
3 zmconv_c0_ocn&zmconv 0.01452
4 zmconv_tau&zmconv_n1 2700
```

包含参数采样、敏感性分析、参数筛选、参数优化、代理模式等功能

```
[parameters]
Parameterum = 3
[para1]
name = zmconv_c0_lnd&zmconv_n1
rangeLow = 0.0025
rangeHigh = 0.00885
default = 0.0059
[para2]
name = zmconv_c0_ocn&zmconv_n1
rangeLow = 0.0225
rangeHigh = 0.0675
default = 0.045
[para3]
name = zmconv_tau&zmconv_n1
rangeLow = 1800
rangeHigh = 5400
default = 3600
```

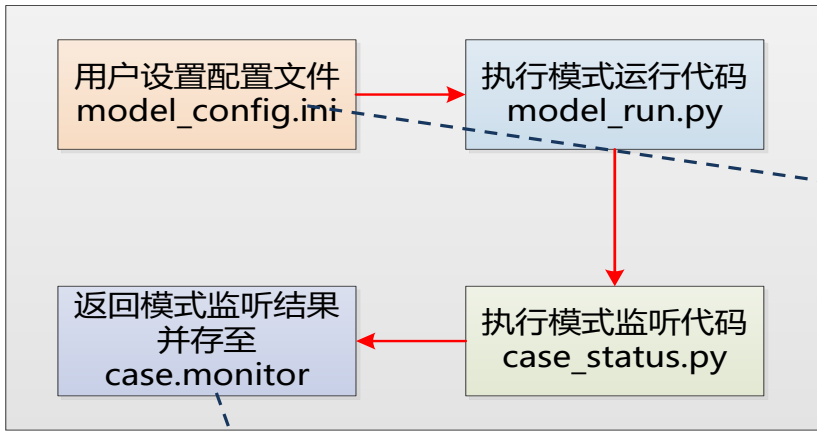
```
[model]
# Model name
#1 CAS-ESM
#2 SCAM
#3 CESM
#4 CWRf
model_name = 3
```

```
35 [module]
36 # 1 screen
37 # 2 surrogate_opt
38 # 3 opt
39 # 4 screen + surrogate_opt
40 # 5 screen + opt
41 # 6 surrogate_model + opt
42 # 7 screen + surrogate_model + opt
43 module_type = 3
44
45 [runtype]
46 #run_type = 1 startup
47 #run_type = 2 continue
48 run_type = 2
```

```
97 [optimization]
98 #1=downhillsimplex
99 #2=cg
100 #3=newton
101 #4=sqp
102 #5=ga
103 #6=sa
104 #7=de
105 #8=cma-es
106 #9=sce-ua
107 #10=pso
108 #multi-obj select
109 #11=multi-obj(11 not support surrogate)
110 OptMethod = 1
111 MaxIter = 40
112 #EnableCAPT = True
113 EnableCAPT = False
```

3.3 参数调优演示-模式配置接口

➤ 步骤3: 进入config文件夹, 修改casesm_config.ini



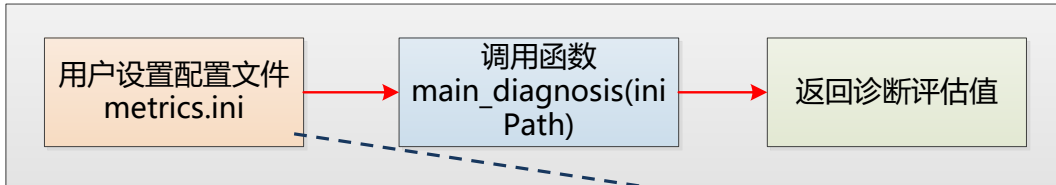
```
1 Casename = 1110
2 Runpath = /home/export/online3/NWP/caiwy/cesm_cases/1110/
3 JobID = 52511206
4 SUCCESS,MODEL OUTPUT HAS BEEN SAVED IN /home/export/online3/caiwy/cesm_cases/1110/
5 FINISHED
```

```
1 Casename = 1219
2 Runpath = /home/export/online3/NWP/caiwy/cesm_cases/1219/
3 JobID = 52524159
4 -9005, SYSTEM ERROR: SUBMISSION FAILED
```

```
1 ###-----Required section-----###
2 #for SCAM runs, only MODEL_MODEL_DIR,CASE are required,
3 #for CESM runs,all sections are required
4 #---model selection---#
5 [BASE]
6 uq_path = /home/users/wujiexia/EARthLab_UQ/
7 [MODEL]
8 modelname = CESM1.0.3
9 [MODEL_DIR]
10 #do not include scripts or models
11 model_dir = /home/users/wujiexia/cesm1_0_3/
12 [COMPSET]
13 #testcases F_AMIP_CAM5 f19_f19, B_1850 f19_g16
14 compset = F_AMIP_CAM5
15 [RESOLUTION]
16 res = f19_f19
17 [CASE]
18 case = case21
19 [MACHINE]
20 mach = thqs_intel
21 [PNAME]
22 pname = x86@ib.cluster
23 [NUM_PROCS]
24 num_procs = 8
25
26 ###-----end of required section-----###
27
28 #####
29 #src code
30 #####
31 [SRC_LOC]
32 #src_loc = /home/users/wujiexi/CESM/pyscripts/
33
34 #####
35 #---namelist
36 #####
37 [IOP]
38 #SCAM only
39 #iopfile = /cesm-input/iop/ARM95_4scam.nc
40
41 #---ATMOSPHERE---#/Buildconf/cam.buildnm1.csh
42 [ATM_PARA] #output frequency
43 zmconv_ke&zmconv_n1 = 3.0
44 avgflag_pertape&cam_inparm = 'A'
45 mfilt&cam_inparm = 1
46 nhtfrq&cam_inparm = -24
47 inithist&cam_inparm = 'DAILY'
48 inithist_all&cam_inparm = .true.
49 uwshcu_rpen&uwshcu_n1 = 0.5E-3
50
51 [ATM_FILE]
52 #ncdata&cam_inparm = '/home/wujiexia/CESM1.0.3/test.nc'
```


3.3 参数调优演示-模式配置接口

➤ **步骤3:** 进入config文件夹, 修改metrics.ini



基础诊断函数	自定义诊断函数
rmse、mse、std、mae	$rmse(U) + mse(U)$
cor、tcor、acor、tcc	$rmse(U) + mae(V)$
mcpi、mle	$rmse(T) + 1/(1-acc(T))$
bss、acc	$rmse(T) + 1/(1-acc(PRAVG))$
mjo、easm、enso	...

```
1 [metrics]
2 #####
3 #model
4 #####
5 ##Select Mode:
6 #1=CESM1.0.3;
7 #2=SCAM
8 #3=CAS-ESM2;
9 #4=WRF3.7;
10 #5=custom
11 MODEL_NAME = 1
12 DATA_PATH = /home/export/online3/NWP/caiwy/cesm_cases/1110
13 OUTDATA_PATH = /home/export/online3/caiwy/diag_output
14 #####
15 #Variables
16 #####
17 ##variable names, 在“etc.”前输入变量: variable1; variable2;##
18 variable = (T); (); (); (); etc.
19 #####
20 #####
21 #####
22 #####
23 #####
24 #####
25 #####
26 #Temporal analysis
27 #####
28 time = (200907010000); (200907310000)
29 #####
30 #diagnosis
31 #####
32 #0=basic
33 #1=custom;
34 func_option = 0
35 ## 诊断分析函数, 0代表已开发的基础诊断分析函数; 1代表用户自定义诊断公式
36 #####
37 ##### if func_option = 0, 在下边function填入诊断函数名; 否则, 不需填写
38 function = (rmse); (); etc
39 ##### end if #####
40 #####
41 ##### if necessary to fill in the parameters , please fill :
42 parameter = (); (); (); etc.
43 ##### end if #####
44 #####
45 # obs data
46 obs_path=/home/export/online3/caiwy/ERA/
```

3.3 参数调优演示-执行

- **步骤4:** 回退至参数调优功能文件夹，运行一键执行脚本

```
(uq) [wujx01@login03 config]$ cd ..  
(uq) [wujx01@login03 ParameterEvaluation_FunLayer]$ cat run.sh  
time=`date +%Y-%m-%d%H%M`  
nohup python ParametersEvaluation.py > log_${time} 2>&1 &  
(uq) [wujx01@login03 ParameterEvaluation_FunLayer]$ sh run.sh
```

- **步骤5:** 查看对应log

谢 谢！