arXiv:2304.05407v1 [physics.comp-ph] 11 Apr 2023

海冰融池参数化的参数敏感性分析及其神经网络模拟

预印本

Simon Driscoll[1], *, Alberto Carrassi[2,1], Julien Brajard[3],Laurent Bertino[3],Marc Bocquet[4],和 Einar Örn Ólason[3]

[1]英国雷丁大学气象系，*RG66BB* [2]意大利博洛尼亚大学“奥古斯托·里吉”物理与天文学系，*Viale Carlo Berti Pichat, 6 40127* 32，/挪威南森环境与遥感中心，*Jahnebakken 3*，卑尔根，*N-5007*，[4]*CEREA*，法国法兰西岛大桥与公路学校及法国电力公司研发部*通讯作者：*s.driscoll@pgr.reading.ac.uk*

2023年4月11日

摘要

准确模拟海冰对于预测未来北极海冰消失、迫在眉睫的气候变化影响等至关重要。北极海冰的一个关键特征是融池的形成。每年，融池都会在冰面上形成，并主要通过影响反照率，对北极的能量收支和气候产生巨大影响。由于融池处于次网格尺度，其演化受到多种相互竞争且尚未得到充分理解的因素影响，因此模型中对其进行参数化表示。

对 Icepack（一种先进的热力学柱状海冰模型）中的先进融池参数化（MPP）进行了基于方差的全局敏感性分析，即 Sobol 敏感性分析。结果表明，模型对其不确定的 MPP 参数值变化非常敏感，而且这些参数对模型预测的影响在空间和时间上各不相同。鉴于融池参数化中的参数（通常数量众多）往往缺乏充分了解，这种极端的参数敏感性使 MPP 可能成为海冰模型预测误差的来源。

机器学习（ML）技术在学习并替代模型中的次网格尺度过程方面展现出巨大潜力。鉴于融池物理过程的复杂性，以及 MPP 中参数值准确性的重要性，我们提出了一种替代性的数据驱动融池参数化方案，以优先提高反照率预测的准确性。具体而言，我们构建了基于线性回归或非线性神经网络的 MPP，并研究它们能否替代 Icepack 中原有的基于物理的 MPP。

我们的结果表明，线性回归不足以用作模拟器，而神经网络能够非常可靠地学习并模拟 Icepack 中的 MPP。采用基于神经网络的 MPP 后，Icepack 的表现仅略微偏离原始 Icepack，整体上仍呈现相同的长期模型行为。

随后，我们基于互信息进行特征选择，寻找能够实现良好性能的最小模拟器。结果表明，仅使用物理融池参数化所需的完整输入变量集合中的一部分，就足以构建一个较小的模型来近似并替代物理融池参数化。这些较小的模拟器不仅计算速度更快，而且从物理角度来看也更易于解释。

尽管仍存在诸多且各不相同的挑战，但在使用真实数据之前，本研究是朝向在海冰模型中采用数据驱动的融池参数化方案的令人鼓舞的第一步。

关键词：
海冰融池；Mac　　机器学习模拟器；Sobol 敏感性分析　　ysis; 参数化

1 引言

北极海冰在全球海洋环流以及调节地球气候和天气方面发挥着至关重要的作用 [例如，Menemenlis et al.，2017年；Sévellec et al.，2017年；Dethloff et al.，2019]。海冰覆盖范围从九月的最小值开始增长，直到北极冰盖在三月达到最大范围 [Kwok，2018], 海冰是一种良好的隔热层，同时也会成为更强隔热层——积雪的承载平台。它像一块盖子覆盖在极地海洋表面，控制着相对温暖的海洋与寒冷大气之间的热量和水汽传输 [Weeks，2010]。

海冰本身具有根本的重要性，也是地球系统中对气候变化最敏感的组成部分之一 [Castellani 等人，2020], 根据卫星观测记录，自 1979 [Serreze 等人、2007年；Stroeve 等人、2012]北极海冰覆盖范围已大幅缩减。气候模型预测，北极海冰将继续消退，21世纪末之前或届时可能出现无冰夏季 [例如，Boé 等人，2009；Wang 和 Overland，2009]。高反照率海冰消失后，深色海洋表面暴露出来，吸收更多阳光，进而加剧地表变暖 [Manabe 和 Stouffer，1980]。这一反馈在全球变暖导致的北极放大效应中发挥着重要作用 [Hall，2004]。

对于气候系统而言，一个重要的问题是理解海冰何时可能在北极夏季完全消失；这对生物学 [Solan 等人、2020], 经济 [Alvarez 等人、2020]以及地缘政治 [Huntington 等人等方面 2022] 均有重要影响。气候模型长期以来严重低估了观测到的北极海冰减少趋势[Boé 等人，2009], 也未能捕捉其他变暖时期的物理变化，例如末次间冰期（LIG）期间北极气温偏高的现象 [Guarino 等人。2020]。

1.1 海冰融池及其在北极气候中的作用

海冰减少以及冰间开阔水道的形成会使海洋表面暴露，从而改变反照率，进而影响北极气候；此外，融池的形成也会对北极气候产生另一项深远影响。融化季期间，冰和雪融水汇集于海冰表面，形成融池，其覆盖面积可达北极海冰表面的 50% [Flocco 等人，2015]。裸露海冰的反照率最高可达0.8，而融池的反照率可能低至 0.15 [Flocco 等人，2015], 夏季融池在北极海冰上的演变是影响海冰反照率、进而影响极地气候系统的主要因素之一 [Li 等人。2020]。

北极海冰反照率的季节演变经历五个不同阶段：干雪、融雪、融池形成、融池演变，以及秋季冻结 [Perovich 等人，2002]。4 月（此时大部分区域覆盖干雪）的反照率通常较高，且整体较为均匀；随着夏季推进，反照率逐渐降低，空间分布也变得不均匀。要在海冰数值模型中考虑这些阶段，就需要对融池效应进行参数化。融池的形状、大小和覆盖范围由多种因素决定，包括冰面地形和可用水量 [Holland 等人，2012]。较薄的年轻海冰上融池所占比例较高（在北极夏季末期），并且由于气候变化预计年轻海冰面积将会增加，融池的影响也将随之增强。数值海冰模型的实验也证实了融池对海冰物理过程和动力学的作用及影响。这些模型对融池参数化表现出很高的敏感性，尤其是在海冰厚度方面 [例如，Ebert 和 Curry，1993]。Flocco 等人 [2010, 2012] 表明，缺少融池参数化（MPP）的模型可能会将夏季海冰厚度高估多达 40%。

其他结果表明了融池过程的重要性，并指出了对其进行准确模拟的必要性。借助改进的模型物理过程和先进的融池参数化，Guarino等人 [2020]表明，哈德利中心 HadGEM3气候模型在末次间冰期模拟中预测了北极夏季海冰的完全消失。他们得出结论，其模拟中的北极海冰消失主要是由于净短波辐射增加，而不是如先前所假设的那样由于大西洋经向翻转环流（AMOC）减缓。他们的结果表明，局地热力学过程和融池形成过程对于捕捉北极海冰消失起着关键作用。因此，对未来北极海冰范围进行高技能模拟需要准确模拟MPP。

1.2 使用机器学习对气候模型中的物理过程进行参数化

机器学习（机器学习）能够准确且高效地识别复杂模式并模拟非线性动力学[Kashinath 等，2021]过去十年中，使用机器学习来模拟气候模拟中的参数化过程已引起了相当大的关注 [例如，Brenowitz 和 Bretherton，2018；Rasp 等，2018；Chantry 等，2021], 主要（但并非仅仅）是因为，与传统的基于物理的参数化相比，模拟器可能会在计算速度方面带来改进 [Thiagarajan 等，2020]。当针对能够明确解析拟参数化过程的高分辨率模型进行训练时，基于机器学习的参数化显示出提升模型性能的潜力 [例如，

Krasnopolsky 等，2013年a；Krasnopolsky，2013年b；O'Gorman 和 Dwyer，2018，针对全球气候模型中的湿对流]。这种"完美模型情景"以高分辨率模型为训练基础，可有效应对适当训练所需的时空密集准确数据集长期匮乏的问题。将数据同化方法与机器学习相结合，可以解决这一问题：前者能够高效处理稀疏且含噪的数据，并提供经分析的场来训练机器学习 [Brajard 等， 2020, 2021]。

1.3 融池参数化的敏感性及其基于机器学习的发现

这项工作有两个相互关联的目标。在第一部分（第3节），我们详细研究 Icepack 模型（一种先进的海冰热力学过程模型） [Hunke 等人，2021年b], 对其基于物理的 MPP 的参数敏感性。我们采用严格的方法来量化这种敏感性，使用 Sobol敏感性分析方法 [Sobol，1993年，2001；Saltelli 等人， 2004]。如前所述，海冰模型中的不恰当 MPP 会导致夏季海冰厚度被高估多达 40% [Flocco 等人， 2010, 2012]。了解 MPP 中不确定性的来源并加以减少，对于实现准确的气候模拟都至关重要。
我们将在研究中看到，Icepack 对其融池参数化方案中的参数表现出复杂且总体上很强的依赖性，进而显著影响关键海冰量的预测。了解不确定性的来源、缩小不确定性范围并精细调整参数至关重要。然而，这通常难以实现，因为融池的真实物理过程和几何形态都非常复杂，因此融池参数化方案通常存在过度参数化的问题。

为了规避物理融池参数化不理想的敏感性，以及相对于参数调优成本而言的有限准确性，在本研究的第二部分（第4节）中，我们研究了现代机器学习在使用尽可能少的输入的情况下模拟融池参数化的能力。我们将展示，神经网络（NN）能够成功学习融池参数化中输入与输出之间的函数关系，并且这种基于机器学习的 MPP可以在完整的海冰模型中替代 Icepack，从而提供准确且稳定的模拟。最后，在第 4.4 节中，我们通过使用互信息工具进行基于互信息的特征选择，寻找规模最小且因此具有可解释性的基于机器学习的 MPP。
我们采用"完美模型"情景，即训练依赖于拟仿的 MPP的输出，这也是迈向使用真实数据的第一步；后续研究将对此进行探讨。我们将在结论以及第 5 节关于未来方向的讨论中提及这一点。

2 海冰模型*Icepack* 及其融池参数化

洛斯阿拉莫斯海冰模型（CICE）旨在为完全耦合的大气—海冰—海洋—陆地全球气候模型开发一个高效的海冰组件 [Hunke 等人，2021年a]。CICE 包含多个交互组件：海冰动力学模型、输运模型，以及子模块 *Icepack* ，该模块模拟 CICE 中所有垂直过程，主要是热力学过程 [Hunke 等人，2021年b]。Icepack 模块可作为独立模型使用，本研究将采用这种方式实现。图1展示了 Icepack 示意图及重要垂直过程的示意。

2.1 Icepack 中的融池参数化

Icepack 通过考虑融池面积和深度来模拟冰上融池的形成。当融池顶部重新冻结，且落在重新冻结盖层上的降雪阻挡太阳辐射时，用于辐射计算的"有效融池面积"可能会减小，而融池体积保持不变。因此，有效融池面积会影响海冰反照率。Icepack 提供三种可显式模拟融池的方案：（1）*CESM* [Holland 等人， 2012], 地形 [Flocco 等人， 2010], 以及平整冰 [Hunke 等人， 2013]。
第一个 MPP 专为社区地球系统模型（CESM）设计。在 CESM 方案中，降雨、积雪以及海冰融水的加入会使融池扩大，而重新冻结则会使其缩小。该方案以经验方式描述融池过程，并假设融池深度与面积呈线性关系。

该地形方案之所以被称为地形方案，是因为它模拟了融水聚集在冰层最低处这一概念 [Flocco 和 Feltham， 2007]。由于Icepack 不会显式模拟冰层地形，因此相对于海平面，将冰厚度分布拆分为表面高度分布和底部深度分布。融水会聚集在表面高度最低的冰面上。在海冰变得可渗透时，该方案中的池水可以重新冻结（影响有效融池面积），也可以垂直排水。
最后一种融池方案，平整冰 [Hunke 等人， 2013], 在 *topo* 的基础上进行了扩展，同时还以一种方式考虑了重力效应：每个冰类别中的融池只能形成于平整（未变形）的冰面区域。在平整冰方案中，融池水也可能重新冻结或排入海洋，具体取决于冰的渗透性。

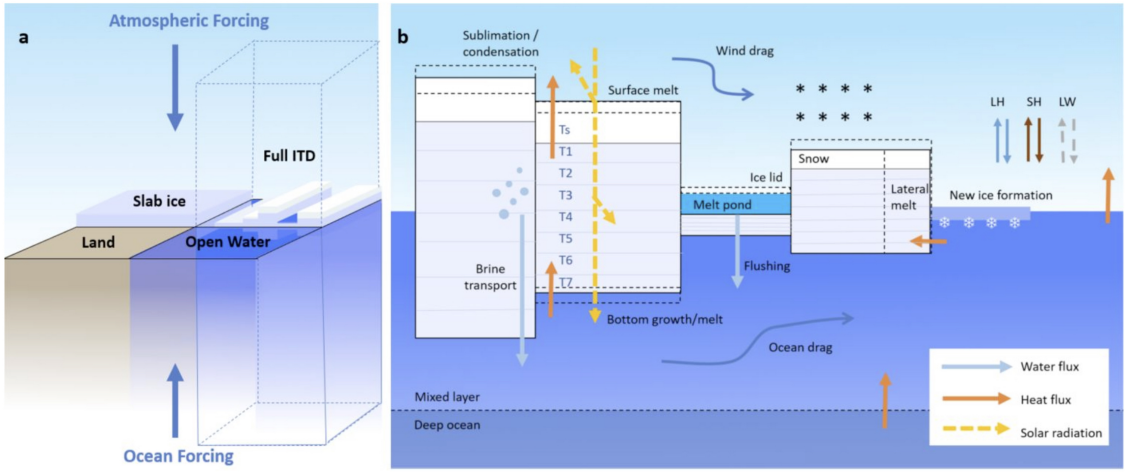

图 1：Icepack模型示意图。图 a：柱状模型设置，包含 4 个区块，分别表示陆地、开阔水面、板状冰（无积雪）和完整的冰厚度分布（ITD）。图 b：使用 ITD 时 Icepack 中表示的主要垂直过程。由 Hofsteenge 和 Ganzeveld 提供 [2020]。

Icepack中平整冰 MPP敏感性分析（SSA）所扰动的参数					
参数符号	参数描述	先验概率分布	最小值	最大值	默认值
hs0	过渡到裸冰的积雪深度（米）	三角分布	0	0.1	0.03
hs1	转变为池塘冰的雪深（米）	三角分布	0	0.1	0.03
rfracmin	融水最小保留比例	三角分布	0	1	0.15
rfracmax	融水最大保留比例	三角分布	0	1	0.85
pndaspect	池塘深度与池塘面积分数之比	均匀的	0.4	1.2	0.8

表 1：Urrego-Blanco 等人给出的参数符号、描述和统计分布 [2016]。我们在图中展示了 SSA 所用的分布。2。

作为 Icepack 中最先进的方案， [Hunke 等人，2021年b], 本研究仅关注平整冰 MPP，以下将其简称为 MPP，无需进一步说明。

2.2 Icepack 的融池参数

Icepack 总共有七个融池参数 [Hunke 等人，2021b], ，尽管并非所有参数都用于平整冰 MPP。我们知道，其中一个参数仅用于“topo”方案，而参数*dpscale*（“改变融池再冻结参数化的冲刷 e 折叠时间尺度”）在使用浆糊热力学选项时不会启用[该选项将海冰视为一个允许盐度剖面随时间演变的浆糊层，正如Turner 等人，2013] 所述。更多详情请参见Hunke 等人 [2021b] 。

表1列出了平整冰 MPP 中的所有融池参数及其不确定性范围，这些范围由Urrego- Blanco 等人 [2016]给出。可以看出，鉴于这些不确定性，了解它们对模型的影响至关重要。因此，我们对这些参数进行 Sobol 敏感性分析（SSA），并探究 Icepack 模型中海冰变量对这些参数取值的敏感性。

3 融池参数的Sobol敏感性分析

3.1 Sobol敏感性分析概述

敏感性分析可以定义为“研究模型（数值模型或其他模型）输出中的不确定性如何分配到模型输入中的不同不确定性来源” [Saltelli 等人， 2004]。在此，我们选择对 Icepack MPP 参数进行 Sobol 敏感性分析 [SSA，Sobol，1993, 2001] 针对 Icepack MPP参数。SSA 是一种基于全局方差的方法，它通过考虑参数之间的相互作用，将模型输出中的方差归因于单个或多个参数 [Sobol，2001；Saltelli， 2002]。例如，在水文模型研究中，SSA 提供了准确性和稳健性最佳的敏感性指数，尤其是在参数相互作用强的模型中 [例如，Tang 等人， 2007]。

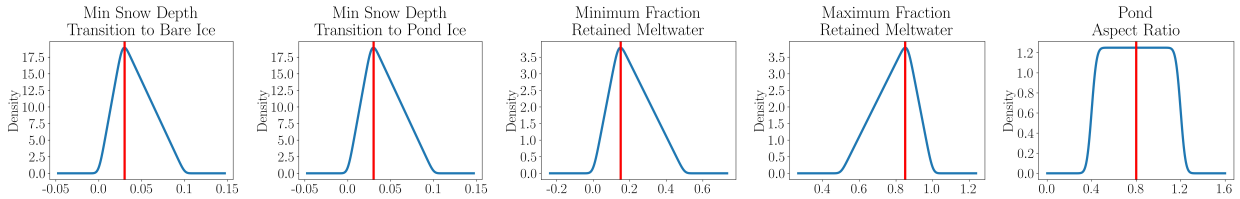

图2：我们使用SALib库为敏感性分析抽样得到的概率分布函数，针对采用糊状热力学方案的平整冰融池参数化中的5个参数（三角分布和均匀分布）。红线表示模型中的默认参数值。为使融水最小保留比例不超过最大值，我们将最小值限制为 $[0, 0.5]$ 和最大值限制为 $[0.5, 1]$。

有关 SSA 的详细描述和解释，例如参见 Sobol [1993, 2001]；Saltelli等人 [2004]。下面对其进行简要概述。考虑模型：

$$\mathbf{Y} = f(\boldsymbol{\lambda}) = f(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_d), \tag{1}$$

其中，$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^m$ 为模型状态向量，$\lambda_i \in \mathbb{R}$；对于 $i = 1, ..., d$，为模型参数，这些参数被认为是相互独立的随机变量，并由反映系统不确定认知的已知分布进行描述。令 $\mathscr{D} = \{1, ..., d\}$。其中，$\Psi_i \subseteq \mathscr{D}$ 为包含第 i个参数的集合，我们定义 $\Psi_i := \mathscr{D} \backslash i$，将其作为 $\mathscr{D}$中的补集，使得：

$$\Psi_i \cup \tilde{\Psi}_i = \mathscr{D}, \qquad \Psi_i \cap \tilde{\Psi}_i = \emptyset. \tag{2}$$

假设我们知道真实的参数值，其中 $\lambda_i = \lambda_i^*$ 对于 $i = 1, ..., d$，并且希望了解每个参数 λ_i 对输出 $\mathbf{Y}$ 方差的影响。我们得到参数 λ_i 的一阶敏感性指数：

$$\mathrm{S}_i = \frac{\mathbb{V}_{\Psi_i}(\mathbb{E}_{\tilde{\Psi}_i}(\mathbf{Y}|\lambda_i))}{\mathbb{V}(\mathbf{Y})}, \tag{3}$$

其中，$\mathbb{E}$ 和 $\mathbb{V}$ 分别为期望和方差算子。

一阶敏感性指数刻画了仅由参数 λ_i 导致的方差占比，即不考虑其与其他参数的交互作用；根据归一化的全方差公式可知，$\mathrm{S}_i \leq 1$。

总敏感性指数由 Hommaand Saltelli [1996] 提出：它们涵盖了参数 λ_i 对输出变化产生的所有贡献，以及该参数与其他参数之间的所有交互作用。总敏感性指数可表示为

$$\mathrm{ST}_i = \frac{\mathbb{E}_{\tilde{\Psi}_i}(\mathbb{V}_{\lambda_i}(\mathbf{Y}|\tilde{\Psi}_i))}{\mathbb{V}(\mathbf{Y})}, \tag{4}$$

其中，$\tilde{\Psi}_i$ 表示除 Ψ_i 之外的所有不确定参数，因此有 $0 \leq \mathrm{S}_i \leq \mathrm{ST}_i \leq 1$，这意味着根据定义，总指数始终大于或等于普通指数。

3.2 Icepack 参数的 SSA

为了对 Icepack模型进行Sobol 敏感性分析，我们使用 Python 中的敏感性分析库 [SALib，Herman 和 Usher，2017]。参数不确定性估计来自 Urrego-Blanco等人 [2016]，，并经过调整以适用于 SALib。尽管 Urrego-Blanco 等人 [2016]针对某些参数给出的对数几率正态概率分布函数在 SALib 中不可用，但我们的目标是研究对参数值的敏感性，而不是降低参数不确定性，因此我们使用三角分布对其进行近似。这些 Icepack 的融池参数的输入参数（及其不确定性范围）见表 1。使用 SALib，通过 Sobol-Saltelli 采样获取该参数空间的全局样本，以实现对该空间的均匀覆盖 [Sobol，2001；Saltelli 等人，2008]。

Icepack 是一个一维热力柱模型，在单个地理位置运行，需要强迫数据来生成海冰面积分数、平均冰厚度等输出。我们选择用于强迫 Icepack 的数据来自 NCEP 气候预报系统第二版（CFSv2）[Saha 等人，2014]。CFSv2 是一个完全耦合模型，用于表示地球大气、海洋、陆地和海冰之间的相互作用。它每天初始化四次（00:00、06:00、12:00 和 18:00 UTC），为我们提供了覆盖多个北极地点、时间跨度超过十年（2011—2022 年）的逐小时数据，用于强迫 Icepack。

Sobol 敏感性分析所用位置			
位置	区域	纬度	经度
1	博福特海	72° N	137° W
2	楚科奇海	69° N	172° W
3	东西伯利亚海	72° N	163° E
4	拉普捷夫海	76.3° N	125.6° E
5	喀拉海	77° 北	77° 东
6	巴伦支海	75° 北	40° 东
7	格陵兰海	76° N	8° W
8	弗拉姆海峡	78° N	0° E
9	林肯海	82° N	58° W
10	巴芬湾	74° N	68° W
11	哈得孙湾	60° N	86° W
12	北冰洋	90° N	0° E

表2：用于我们对Icepack模型进行SSA分析的位置代表北极12个物理上不同的区域。

SALib 库中针对给定参数空间的 Saltelli 采样器会生成 $N \times (2d + 2)$ 个样本，其中 N 是选定的整数；为保证均匀子采样，该值必须是2 的幂，且 d 是参数输入的数量。若 N 取值过低，则意味着对参数空间的采样不足。在本研究中，为确保对参数空间进行充分采样，我们使用 $N = 128$，其中包含 $d = 5$ 个参数（参见表1），从而在每个地点进行 1,536 次模拟。随后，使用这些经过扰动的参数输入组合运行 Icepack，并对后续模型输出执行 SSA，以计算敏感性指数。
我们选择重点关注北极地区12 个具有不同物理特征的位置（表2），以刻画北极各区域的响应。这12 个位置在2011–2022年期间进行了1,536 次模拟，相当于约200,000 年的Icepack模型数据，我们据此对Icepack模型的融池参数进行SSA分析。

可以说，在对海冰进行建模时，最重要的两个变量是海冰厚度和面积分数，它们有效地代表了给定区域内海冰的总体积。图 3 展示了 SSA 的结果：这些关键海冰变量的一阶和总阶 Sobol 指数。因此，在图 3中，我们分析了 Icepack 模型中与海冰体积相关的变量对其融池参数的敏感性。

图 3 展示了在整个模拟时段（2011—2022年）内取平均的月平均一阶和总阶敏感性值。我们展示了Icepack融池参数化中五个参数中的四个参数的敏感性（参见表 1）：参数“过渡到裸冰的雪深”（$hs0$ 见表1）在当前方案中没有影响，因此从分析中排除。Sobol指数在 12 个位置上取平均，以得到单一的平均一阶和总阶Sobol指数，垂直灰线表示这 12个地理位置上的标准差。因此，图 3 量化了模拟冰厚度和面积分数对四个参数的敏感性，同时也体现了其季节性和地理变异性。

图 3 表明，模型对每个参数的敏感性存在差异——也就是说，并非所有参数的影响都相同。参数*hs1*（标示转变为池塘冰的雪深，以蓝色表示）在所有Sobol指数和变量中影响最小。其他参数与可添加到融池中的最小和最大可用融水量有关，而最后一个参数决定融池的长宽比（即给定体积融池的面积/高度比）。对于给定体积的融池，改变长宽比以形成深度更小但表面积更大的融池，会导致其吸收更多入射太阳辐射，从而进一步融化。相比之下，相同体积的深而狭窄的融池虽然会吸收入射太阳辐射，但会留下更大的裸冰暴露区域，将入射太阳辐射反射掉。我们的SSA结果支持这样一个事实：在对融池进行模型建模时，添加到融池中的融水量和融池的表面积是至关重要且显然具有显著影响的特征。

不同变量的一阶指数与总阶指数之间存在定性差异（例如图3a-c 和图3b-d），这表明 Icepack模型对其所有融池参数的敏感性（以 ST 衡量）比单独改变参数所产生的影响（以 S1 衡量）更加复杂。根据定义，总阶指数总是大于一阶指数，因为总阶指数既包括对该参数本身的敏感性，也包括高阶交互作用。例如，图3a 和 b）中 S1 最小的参数（*hs1*），在考虑与其他参数的交互作用后，对模型输出的影响会大得多（比较图3a 和图3c 中该参数的 S1 和 ST）。所有参数都呈现相同情况，这表明在海冰模型中单独微调参数或许并非

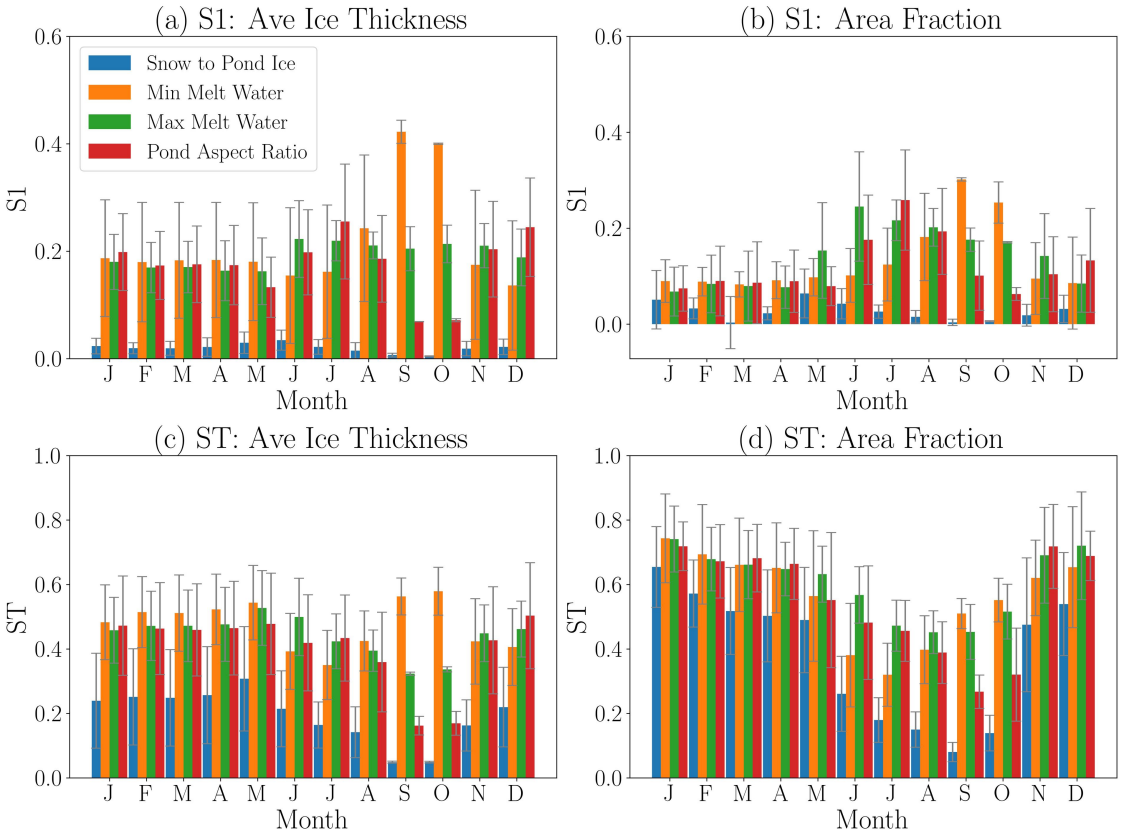

图 3：表中 5 个参数对应的月度一阶和总阶 Sobol 指数。1，为 2012年-2022年期间的平均值，并对表中的全部12 个地点取平均。2。月度平均值的须状图显示了12 个地点的总阶 Sobol 指数标准差。

必然是最佳方法，因为这种做法会忽略高阶效应。尽管一阶效应很重要，但它们忽略了高阶交互作用以及各参数对模型输出的“总贡献”。因此，在本分析余下部分，我们将主要关注总阶 Sobol 指数。

Icepack输出对所有这些参数的敏感性会随一年中的时间而变化。我们观察到，随着进入夏季，Icepack模型的面积分数对其融池参数的ST呈下降趋势（图 3d）。这可能是由于随着夏季临近，北极的大面积区域出现无冰期，从而限制了融池参数的影响：可供融化的冰更少。尽管如此，北极并非所有区域都会完全融化并形成无冰区，因此我们可以看到，即使在整个夏季，任何指数和变量的平均值也都不为零。这一解释进一步得到了各位置较大标准差（灰色竖线）的支持，这表明，虽然较低纬度的位置可能已无冰，但较高纬度的位置仍然存在冰。

为了进一步揭示模型对参数的敏感性所具有的地理依赖性——这体现了不同且主导程度各异的物理过程——我们考察了两个典型位置的模型运行结果。第一个是最南端的位置：哈得孙湾（#11 见表2）：冬季会完全结冰，但夏季会解冻。第二个是最北端的位置：北冰洋（#12 见表 2）。图4 展示了用于 SSA 的集合中每个扰动参数成员的月平均海冰厚度时间序列。这两个位置之间的差异极大。我们发现，改变融池参数值不仅会因位置不同而产生显著不同的影响，而且对于北冰洋位置（面板 a），预测的海冰厚度差异可达 $\approx 2-3$ 米。

总体而言，我们的结果表明，Icepack模型对其融池参数高度敏感，而且这种敏感性会随时间和空间而变化。这意味着，在不同地点测试并针对这些地点进行微调的参数，通常无法在其他地方达到最优。在某一地点进行稳定性测试和微调的参数化，可能对该地点的模型输出影响甚微。与此同时，这些细微的稳定性

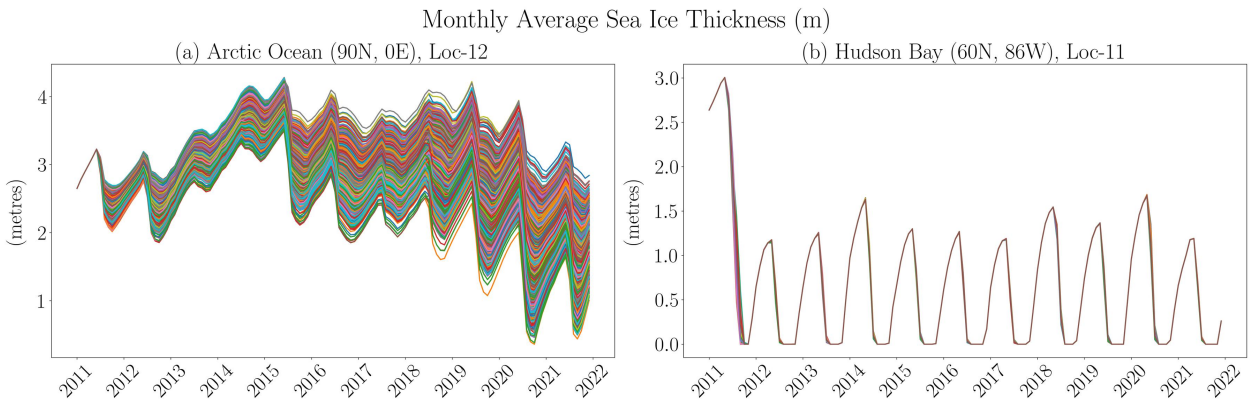

图4：在所有采样参数值下，SSA 所选最南端和最北端位置的月平均海冰厚度（米）时间序列。每条线代表各位置 1,536 个成员集合中的一次独立模拟。

微调却可能对另一地点的模型输出产生重大影响。不过，我们可以看到，在某一地点看似无关紧要的参数值微小变化，可能会对另一地点的海冰厚度预测产生巨大影响。尤其值得注意的是，这些参数的微小扰动可能导致北冰洋预测的海冰厚度相差数米，这一情况发生在约十年的时间跨度内，对长期预测和气候变化预测尤为重要。

气候模型参数化（如 Icepack 中的 MPP）通常在地理和时间上保持不变，采用“一刀切”的方法。理想情况下，参数化应纳入时空依赖性，并考虑北极地区导致融池形成的复杂过程。在某个区域看似无关紧要的不确定性，可能会导致另一个区域的海冰预测截然不同。数据驱动参数化能否准确模拟不同地理位置和季节下的融池物理参数化？它们能否提供一种替代方案，成为计算成本更低的解决方案？它们对参数设定是否不那么敏感？本文余下部分将探讨这些问题。

4 融池反照率融池参数化的模拟

我们旨在了解模拟器能否学习并取代基于物理的 MPP。我们将在“完美数据”假设下开展研究，即使用 MPP 的精确（且完整）输出训练模拟器，使其能够复现 MPP。虽然在后续研究中，我们会放宽这一假设，改用真实数据训练模拟器（见第 5 节，了解我们正在开展的工作及未来方向），但这一初步步骤意义重大，因为它有助于详细了解合适的神经网络架构、其学习相关物理过程的能力，以及其计算稳定性。

我们将遵循两阶段实验方案。首先，在所谓的“离线模拟”（第4.2节）中，我们旨在学习物理融池参数化的输入到输出映射。随后，在“在线模拟”（第 4.3节）中，我们将基于机器学习的 MPP 接入完整的海冰模型 Icepack，替代原有的物理融池参数化。后一阶段的挑战要大得多，因为它还要考察基于机器学习的参数化在长期运行中的计算稳定性。

4.1 数据集和神经网络设置

我们创建了许多Icepack模型的模拟，从而构建一个用于神经网络学习参数化的训练数据集。与SSA一样，我们为Icepack选择的强迫数据来自NCEP气候预报系统第二版（CFSv2）。不同于我们的SSA研究，无需将数据库样本限制为从12 个地点提取的数据。因此，在我们的机器学习实验中，我们从CFSv2数据集中选择了100 个在北极圈及其附近纬度范围内随机选取的海洋网格点（见图5）。北半球海冰出现率最低的区域位于日本北海道沿岸 [$\approx$ 43° N，Takahashi等人， 2011]。因此，我们的100个地点是从CFSv2数据集中随机选取的（即在 1.875° $\times \approx$ 1.904° 分辨率网格上、纬度介于 60°N和 90°N之间）。这样得到的地点大多位于北极圈内，同时也允许训练和测试地点位于例如加拿大的哈得孙湾——该区域以海冰覆盖率高而闻名。

MPP 的输入包含许多模型变量，例如表面温度、平整冰面积比例、融池所保留的水分数、降雨率、雪融、冰顶融化、海冰上积雪与融池冰之间的深度差，以及

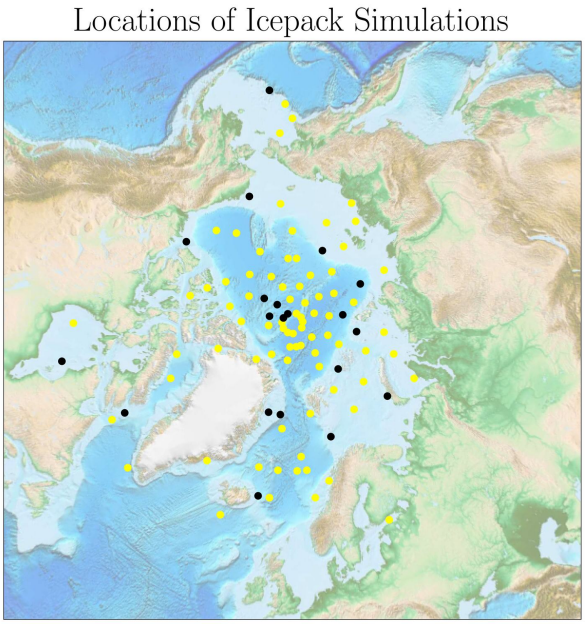

图5：从 CFSv2 的 $1.875° \times \approx 1.904°$ 分辨率网格中随机选取的 Icepack 模拟位置，位于 60°N 至 90°N 纬度之间。黄色位置为训练数据位置，共 80 个；黑色位置表示测试阶段留出的地点（20 个）。

.

等等。MPP 中计算的四个输出变量（例如，目标变量）分别为融池面积、融池高度、冻结盖层高度（这些变量在上一时间步计算/输出的值也会作为下一时间步的输入），以及用于融化冻结盖层的大气/冰热通量占比；后者在每个时间步均仅根据输入变量重新计算，因此四个目标变量中的三个还会显式使用其上一时间步的值进行计算。输入和目标的完整列表见表 3

我们针对每个目标分别训练一个神经网络，共训练四个，而不是训练一个多目标神经网络。导致不同 MPP 目标出现的过程似乎大不相同，这意味着单个神经网络要同时重现所有这些过程面临着固有挑战。因此，我们放弃了用一个神经网络训练所有目标的优势，以换取更大的灵活性。按照惯例，我们将完整数据集划分为训练数据、验证数据和测试数据，以了解模型在未用于训练的数据上的表现：我们留出一部分数据，并要求模型对该时段进行预测。对于本研究中的这类时间序列数据，通常按时间划分数据 [例如，滚动前向Assaad 和 Fayek， 2021]。由于我们处理的是多个地点的许多时间序列，因此改为按地点划分数据，即神经网络使用 2012年–2021年（含）期间 Icepack 模拟的完整时间序列数据进行训练，覆盖北极的80 个地点（图5中的黄色圆点）。20 个测试地点（图5中的黑色圆点）用于评估我们的模拟器是否学到了底层物理过程，以及能否模拟北极其他地区的海冰融化。采用这种训练数据和测试数据空间划分方式得到的结果，与更常见的时间划分方式（使用 2011–2019 年数据进行训练，并使用 2020年–2021年数据作为测试数据）非常接近（未显示）。

鉴于超参数对神经网络性能的重要性，我们首先进行了超参数优化[Hutter 等人， 2014] 使用 Hyperband [Li 等人， 2018], 这是一种新颖的基于多臂赌博机的方法：通过提前停止和自适应资源分配来加速随机搜索。我们在一个超参数空间中进行搜索，其中包含节点数、层数和激活函数类型。Hyperband 选出了四个深层神经网络，它们在离线训练中取得了略好的分数。我们以验证集为基准评估性能，训练集、验证集和测试集按 60，20 和20 个位置划分。这些深层神经网络导致 Icepack 稍有不稳定，因此我们减少了隐藏层的数量，并在合并后的训练集和验证集（图 5中所有 80个黄色位置）上训练较浅的神经网络。我们主观地选择这些浅层神经网络，以在准确性和复杂性之间取得平衡。此后，所有结果均基于图 6所示的这些浅层神经网络。这些神经网络

Icepack 的 MPP 中的输入/特征和输出/目标	
特征	**描述**
rfrac	为融池保留的水分数
融化	顶部融化速率（m/s）
融化	积雪融化速率 (m/s)
frain	降雨率 ($kg/m^2/s$)
Tair	空气温度（K）
fsurfn	大气-冰面热通量 (W/m^2)
dhs	海冰和融池冰上积雪的深度差（米）
aicen	海冰面积分数
vicen	冰体积（米）
vsnon	雪体积（米）
Tsfcn	表面温度（° 摄氏度）
alvl	平整冰面积比例
apnd†	融池面积比例
hpnd†	融池高度/深度
ipnd†	融池再冻结盖层厚度
目标	**描述**
apnd	融池面积比例
hpnd	融池高度/深度
ipnd	融池再冻结盖层厚度
ffrac	fsurfn融化ipnd的比例

表3：“糊状热力学”选项下水平冰方案中融池参数化的所有变量特征（输入）和目标（输出）。还会向 MPP 提供常数，例如*nilyr*（冰层数量）、*dt*（以秒为单位的时间步）、*ktherm*（热力学方案选项），并且提供给 MPP 的变量可能并不适用于所有方案。例如，由于糊状热力学方案处理冲刷，*dpscale*（冲刷的替代 e 折叠时间尺度）和 *qicen*（冰层焓）不需要用于冰盐水渗透率的显式计算。我们的表格包含了使用糊状热力学方案进行水平冰融池参数化时的所有相关输入，并采用 Icepack模型中的所有默认参数选项——详见 Hunke 等人 [2021b]。对于每个时间步，Icepack 会调用 MPP 5 次，每个冰类别调用一次。†

表示前一个时间步的值。

在这80个位置上训练50个周期，最后我们报告其相对于测试位置的性能；这些测试位置在模型选择过程中被保留，未参与模型选择。

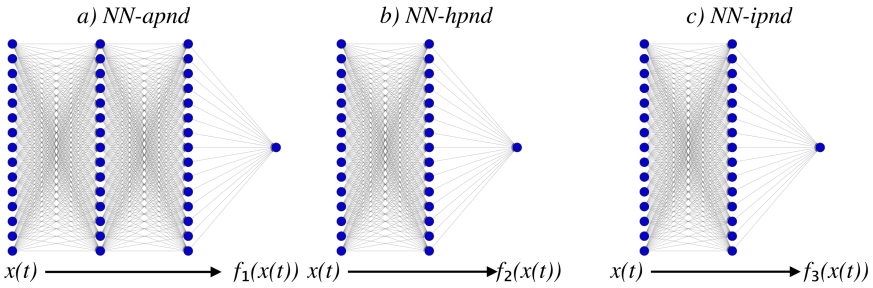

图 6：用于融池面积、融池高度、冻结盖层（“ipond”）高度以及用于满足冻结盖层的海气冰热通量比例的神经网络架构示意图。所有网络均在输出层使用 Sigmoid 激活函数；除最后一个神经网络外，所有网络的隐藏层也使用该激活函数，而最后一个神经网络的隐藏层使用 swish 激活函数。神经网络的训练均使用 50 个周期。

4.2 基于机器学习的融池参数化——离线模拟

图 7显示了预测值与目标（物理MPP 预测的值）的散点图，以及相应的 R^2 分数和均方误差（MSE）。该图表明，总体而言，神经网络已经能够学习物理MPP中的特征到目标之间的关系。对于三个目标——融池面积、融池高度和“ipond高度”（即冻结融池上冰盖的高度）——其表现非常出色，达到了极高的 R^2 分数（$>\approx 0.97$ 对于全部三个目标）。对于第四个目标“Frac A/I Heat Flx”，其表现处于中等水平（R2$= 0.568$），但这确实是一个复杂得多的变量，表示计算得到的用于融化冻结盖层的大气/冰热通量所占的比例。

该*ffrac* 目标几乎总是为零或一，其中 $ffrac = 1$ 占 $\approx 0.25\%$ 的数据集，即 $0 < ffrac < 1 \approx 0.04\%$ 的数据集中的样本；其余所有样本则为 $ffrac = 0$。因此，这是一个极端类别不平衡的学习问题。由于*ffrac* 几乎总是为零或一，因此该问题非常接近类别不平衡的二元分类问题。传统机器学习算法假设各类别中的样本数量大致相等 [例如，Krawczyk， 2016], 且算法会偏向多数类。由于学习*ffrac* 相当于学习一个非线性且极端不平衡的问题，因此它与其他三个目标有很大不同。尽管如此，我们将在第 4.3 节看到，神经网络的表现足以支持对我们参数化方案进行在线模拟。

从神经网络学习物理融池参数化中输入与输出关系这一目标来看，变量 *ffrac* 的难点也在于其强烈的时间变化性。相比之下，其他三个变量直接取决于它们在上一个时间步的值（这是融池参数化的输入，见表3），因此即使仅使用线性回归，也能够以足够的精度预测它们的未来值；见表 4。尽管如此，表 4 还显示，虽然线性回归在捕捉四个目标变量中的两个（融池面积和高度）方面表现出色，但神经网络在所有目标变量上的表现均优于线性回归。尤其对于热力学特征明显的目标变量（*ffrac*），神经网络带来了显著提升，而线性回归几乎不具备预测能力。

线性回归和神经网络测试数据得分				
均方误差				
	apnd	hpnd	ipnd	ffrac
线性回归	6.03×10^{-4}	1.45×10^{-6}	5.56×10^{-6}	3.07×10^{-3}
NN	$\mathbf{3.23\times10^{-4}}$	$\mathbf{6.24\times10^{-7}}$	$\mathbf{1.65\times10^{-6}}$	$\mathbf{1.35\times10^{-3}}$
R^2 分数				
线性回归	0.983	0.997	0.923	0.017
NN	**0.991**	**0.999**	**0.977**	**0.568**

表 4：测试数据中，针对四个目标变量的线性回归和神经网络得分。误差是相对于 MPP 本身给出的目标变量计算的。*apnd* 和*ffrac* 是无量纲变量，*hpnd*和*ipnd* 以米为单位。（粗体数字表示性能更佳）

4.3 基于机器学习的融池参数化——在线模拟

“在线模拟”挑战在于将完整海冰模型 Icepack 中原有的基于物理的 MPP 替换为基于机器学习的 MPP，并研究新的基于机器学习的 Icepack 的准确性和稳定性。为完整起见，并为了理解融池形成过程的性质和复杂性，我们将原始 Icepack（下文称为）*Icepack-Phys*）与我们的非线性神经网络 MPP（*Icepack-NN*）以及 *Icepack-LR* 进行比较，其中 MPP 基于线性回归。与离线模拟一样，实验覆盖 2011—2021年，针对图 5所示的 20 个测试地点进行；性能评估针对的是线性回归和神经网络模拟器在训练期间均未见过的地点。

针对离线学习进行优化并在表 4 中展示的线性回归，无法直接用于在线环境，因为它没有取值范围限制，往往会预测出统计上合理但不符合物理规律的数值，例如融池面积分数大于一或小于零。虽然这已经指出了未加约束的标准线性回归存在固有局限，但为了便于比较，在接下来的实验中，我们会限制线性回归的输出，使其仅产生物理上合理的数值。具体而言，四个目标变量的预测值下限均设为零，而 *apnd* 和 *ffrac* 的上限均设为一。例如，如果线性回归预测的融池高度为负值，我们就将其设为零。值得注意的是，神经网络在结构上具有取值范围限制，因为所有输出都使用了 Sigmoid 激活函数。采用其他激活函数（如 ReLU 和双曲正切函数）也会得到非常相似的结果（此处未展示）。

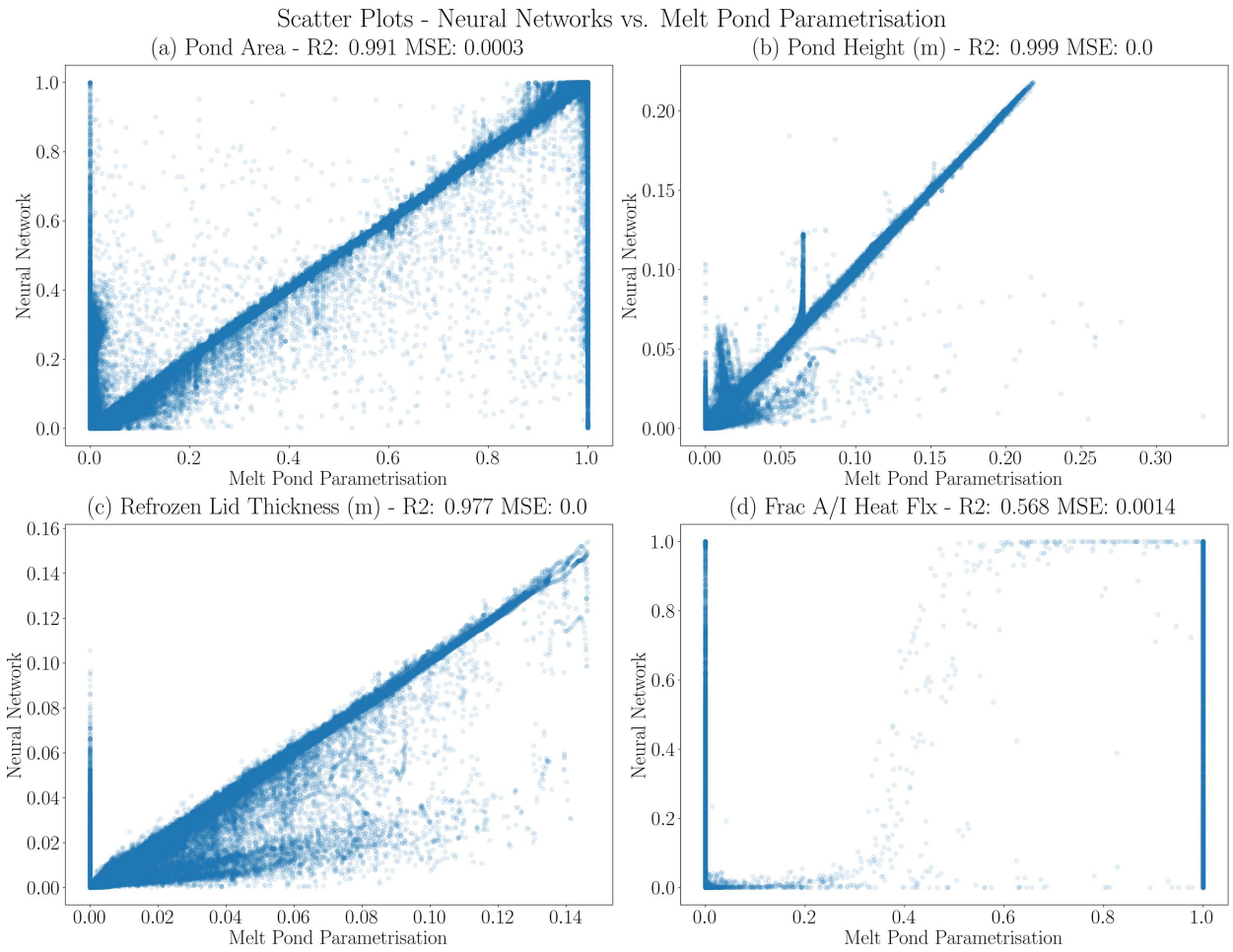

图 7：四个目标变量的散点图，对比其真实值与神经网络给出的预测值。

图 8 展示了 Icepack-LR 和 Icepack-NN 的误差时间序列；误差值是相对于 Icepack-Phys 计算的。与 Icepack-NN 对融池面积分数（图 a）的预测非常准确不同，Icepack-LR 会迅速偏离 Iceapack-Phys，模拟出不切实际的极大融池面积分数，并且几乎全年都有大量融池覆盖。Icepack-LR 的融池高度（图 b）与 Icepack-Phys 有显著差异，结果总体表明，Icepack-LR 所表示的状态中，大面积融池都被冻结盖层覆盖。Icepack-Phys 与 Icepack-LR 之间的相关性（图 e）并不显著。这凸显了线性回归在表示融池方面的不足，也进一步体现了相关过程的非线性特征。

图 9 的格式和内容与图 8相同，但它展示的不是 MPP 输出，而是在 Icepack 中模拟的关键海冰变量的误差时间序列：海冰面积分数（*SIAF*；面板 a）、平均冰厚度（*AIT*；面板 b）、融池反照率（*PA*；面板 c）和有效融池面积（*EPA*；面板 d）。面板 e 和 f 给出了平均相关性。

图 9 揭示了 Icepack-NN 与 Icepack-LR 之间的重要差异。Icepack-NN 在海冰面积分数方面的误差（图 9a）相当小，平均而言，Icepack-NN 略微高估了海冰面积分数。这是因为夏季融池面积略小，导致融化较少，入射下行辐射造成的增温和吸收也较少，进而无法进一步加热海冰并降低海冰面积分数。在这些夏季月份，Icepack-LR 的误差是 Icepack-NN 的两到三倍。Icepack-LR 对融池的刻画明显不如 Icepack-NN，几乎没有表现出夏季融化/反馈。

当平均冰厚度相对于 Icepack-Phys 过大时，这种行为的影响便会显现；而且在 Icepack-LR 模拟的第一个夏季就已开始出现。相比之下，Icepack-NN 的误差较小

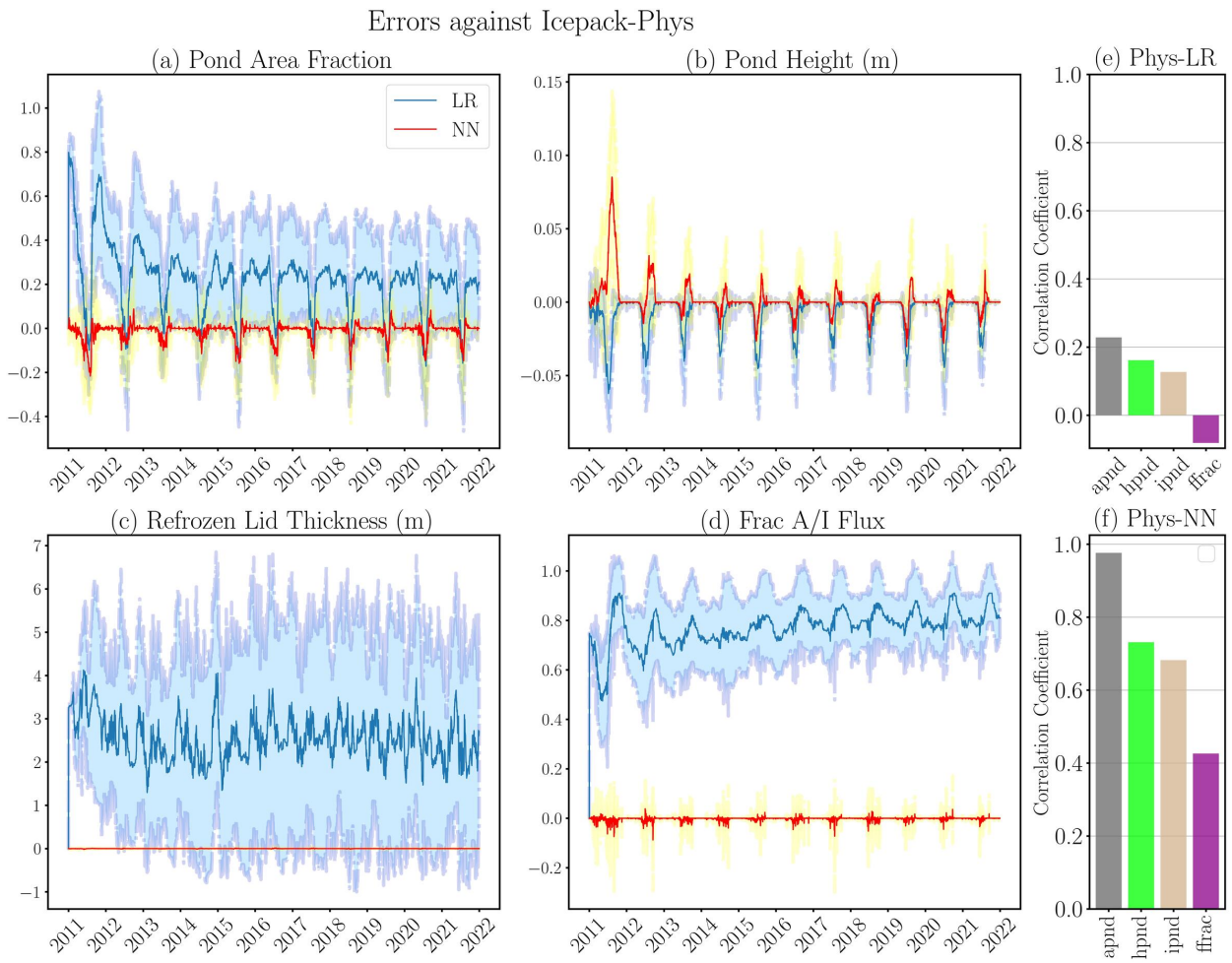

图 8：MPP 四个输出变量的误差时间序列：(a) 融池面积分数 (apnd)，(b) 融池高度 (hpnd)，(c) 融池再冻结盖层厚度 (ipnd)，以及 (d) 表层用于融化的“大气—海冰净热通量”分数 (ffrac)。这些值是相对于 Icepack-phys 计算的，分别对应 Icepack-LR（蓝色）和 Icepack-NN（红色）。实线表示所有模拟（涵盖所有地理位置）的日平均值；蓝色（Icepack-LR）和黄色（Icepack-NN）阴影分别表示均值上下一个标准差的范围。面板 e 给出了 Icepack-phys 与 Icepack-LR 四个目标变量日均值的皮尔逊相关系数，面板 f 则给出了 Icepack-NN 的相关系数。

在第一年内（图9b），无论是平均冰厚度还是海冰面积分数，误差都较小。这意味着 Icepack-NN 能够生成融池，因为它不会像 Icepack-Phys 那样，因夏季海冰融化相对不足而受到影响，也不会导致冰厚度立即增加（参见 Icepack-LR 在模拟一年内0.5 米的平均误差）。

图 9c 和9d 展示了 Icepack 中辐射方案的重要变量演变：融池反照率和有效融池面积。一方面，Icepack-NN 对这两者的误差都相对较小，表明该模拟器在Icepack 中运行时，能够相当一致地生成与物理融池参数化相符的融池。另一方面，Icepack-LR 的表现并不一样好。例如，图 9d 显示，大面积的融池被冻结盖层覆盖（即几乎完全被覆盖），而 Icepack-Phys 在每年夏季的有效融池面积均为正值。此外，我们看到，相对于 Icepack-Phys，Icepack-LR的“有效融池面积”每年都存在负误差值（这对应于裸露融池面积，即未被冻结盖层覆盖、但暴露出开阔水面的融池面积），表明其有效融池面积非常小或不存在。Icepack-LR在冬季的有效融池面积与Icepack-Phys 相同：对于其上方的入射辐射而言，冰与被冰覆盖的融池是相同的。因此，到模拟结束时，这导致平均海冰厚度显著增加，平均约增加 1 米。

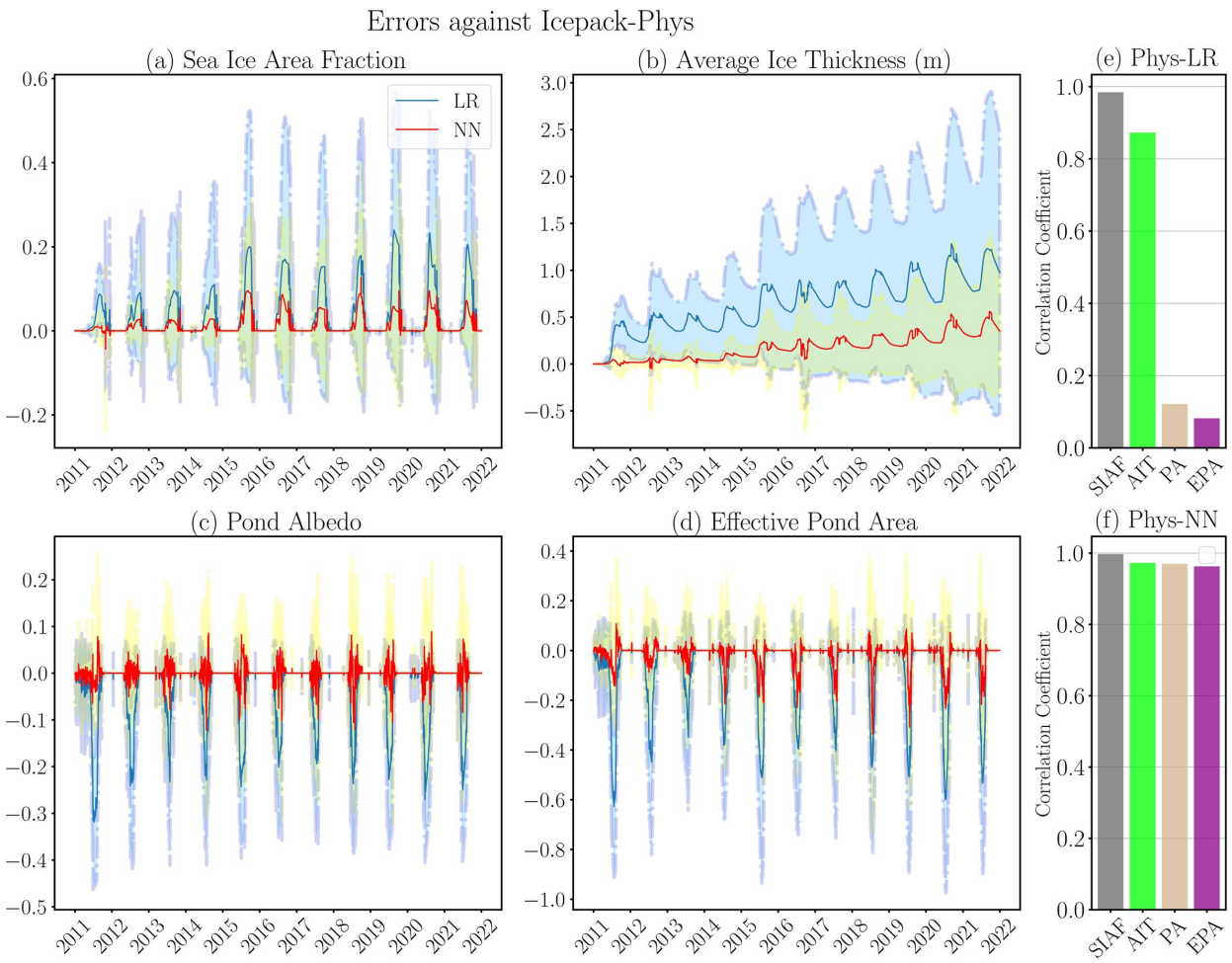

图9：线性回归和神经网络的误差时间序列，二者均与关键输出变量的物理融池参数化进行比较。阴影表示实线均值线上下各一个标准差宽度。（注：SIAF= “海冰面积分数”；AIT = “平均冰厚度”；PA = “融池反照率”；EPA = “有效融池反照率”）

图中相关性图 9 显示，尽管 Icepack-LR 与 Icepack-Phys 在海冰面积分数和平均冰厚度之间存在很高的相关性（这表明模型强迫在保持 Icepack模型输出之间的某种关系方面发挥了重要作用），但在融池相关变量方面的相关性较差。总体而言，线性回归在模拟融池参数化方面表现非常糟糕，因此需要采用比使用 Icepack-LR 更强大的技术。

相比之下，图 8 显示，相较于 Icepack-Phys，Icepack-NN 中的数值并未出现如此快速的增长和偏差。不过，在夏季/融化季会出现小到中等程度的误差，但冬季基本上会回归到零融池，这与 Icepack-LR 不同。Icepack-NN 平均略微低估融池面积分数，而融池高度仅高估约 1 至 5 厘米（图 8）。相关系数和误差时间序列总体表明，在图 8 和图 9中，Icepack-NN 与 Icepack-Phys 均吻合良好。融池面积（以及有效融池面积）略小，会导致平均冰厚略大。约 4–5 年后，Icepack-NN 的平均冰厚确实出现了一些漂移，表现为相对海冰厚度逐渐缓慢增加。我们认为，这是因为与 Icepack-Phys 相比，Icepack-NN 对融池的表征略少。重要的是，Icepack-NN 没有出现 Icepack-LR 中所见的快速误差变化，其误差水平甚至低至 Icepack-LR 的一小部分。结果表明，此处使用的神经网络能够以合理的精度模拟 MPP，虽略微低估融池，但也说明神经网络可用于模拟物理参数化，而且在大多数情况下不会导致显著漂移或不稳定性。

下一节中，我们将对 Icepack-NN 中基于神经网络的融池参数化进行特征选择，以确定仅使用数量较少的最重要输入的模型是否仍能取得合理的性能，并为构建

一个（计算成本进一步降低、可能经过观测数据训练的）模拟器奠定基础，使输入与输出之间的关系清晰且具有物理可解释性。

4.4 使用互信息进行特征选择

鉴于机器学习应用广泛且效果显著，例如 [通用逼近定理（UAT），Hornik 等人， 1989] 该定理指出，存在一个多层前馈神经网络，能够以任意所需的精度逼近任意 Borel 可测函数，因此机器学习技术得到了广泛应用。这使得神经网络能够预测模型或函数，但并未提供如何构建模型的指导，例如如何从物理学角度构建模型，也未说明模型的可解释性。因此，机器学习可以在科学领域的诸多不同问题中被近乎“盲目”地使用，从而产生表现良好、却如同“黑箱”的模拟器 [例如，Camburu， 2020], 人们难以从中辨别其背后的物理、社会、经济等驱动因素。

特征选择有助于通过识别对输出影响最大的输入来构建最简模型，从而揭示更为重要的物理机制。简化后的模型更易于解释，通常计算开销也更低。在本研究中，我们针对每个 MPP 目标相对于输入特征，使用互信息方法对训练数据进行特征选择。互信息 [Shannon， 1948] 用于衡量一个（或一组）随机变量所包含的关于另一个随机变量的信息量。本质上，它衡量两个（或两组）连续或离散随机变量之间的依赖关系。

设 X 和 Y 为随机变量，其概率密度函数分别为 P_X 和 P_Y，定义域分别为 $\mathcal{X}$ 和 $\mathcal{Y}$。另定义其联合概率密度函数为 $P_{(X,Y)}$。 X 与 Y 之间的互信息定义为

$$I(X;Y) = -\int_{\mathcal{X}}\int_{\mathcal{Y}} P_{(X,Y)}(x,y)\ln\left(\frac{P_{(X,Y)}(x,y)}{P_X(x)P_Y(y)}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y, \tag{5}$$

[例如，Frénay 等人， 2013]。因此，互信息可以理解为：一旦知道了 Y， X 的值的不确定性就会降低，反之亦然。它还具有一个关键优势，即能够检测变量之间的非线性关系，从而无需对特征与目标之间的线性关系作出任何假设。

图 10显示了每个目标变量相对于各特征的互信息得分。对于融池面积（图 10a）、融池高度（图 10b）和再冻结盖层高度（图 10c），最大的互信息得分出现在该目标与同一变量在上一个时间步的值之间（请注意，它们属于特征；见表 3）：这些特征在决定下一时间步的值时发挥最主要的作用。相比之下，对于用于融化冻结盖层的大气/冰热通量占比（“Frac A/I H flux”，图 10d），可以看到更为渐进的下降趋势，这表明该变量的预测能力来自纳入更多特征后的累积总量。

与 Icepack-NN 中所采用的相同神经网络（图 6）使用 $n = 1.....15$ 个特征进行训练（见表 3），这些特征按照针对每个目标的互信息分数排序。例如，对于融池面积，根据图 10中的结果，这意味着按如下方式训练神经网络：对于 $n = 1$，仅使用前一时间步的融池面积作为特征；对于 $n = 2$，使用前一时间步的融池面积和融池高度；对于 $n = 3$，使用前一时间步的融池面积、融池高度以及表面温度；以此类推，直至纳入所有特征（$n = 15$）。这一过程针对全部四个目标变量重复进行，共训练 60 个神经网络，每个网络训练 25 个训练周期。在离线模拟设置下，这些神经网络的 R^2 分数如图 11 所示。

与互信息分数一致，我们观察到，对于融池面积、融池高度和冻结盖层高度，即使仅使用（适当的）一个、两个或三个输入，也能获得非常好的 R^2 分数。请回顾图 10 ，这些影响力很大的特征正是前一时间步的相同变量。这表明，只要知道融池在前一时间步的取值以及表面温度等少数关键变量，就可能构建出良好的融池模拟器。然而，对于大气/冰热通量的比例（红线），其数值的确定受到更多因素的共同影响。因此，特征较少的神经网络（< 8）的 R^2 分数非常低；实际上，需要使用完整的特征集合，才能达到与前三个变量仅使用少量（≤ 3）特征时同样出色的 R^2 分数。

现在，我们在在线模拟的背景下，对所需特征进行同样的检查，并针对1 至15 个特征，在全部 20 个测试地点运行 Icepack-NN（即 Icepack-NN，其中四个独立的神经网络分别使用 1 个、2 个、3 个特征，依此类推，特征按互信息准则给出的重要性排序）。请注意，情况 $n = 15$ 与第 4.3 节讨论的使用全部特征的 Icepack-NN 相同。图 12 展示了四个融池目标变量的均方误差（MSE；a 和 c 图）以及皮尔逊相关系数（b 和 d 图）。虽然已有结果表明，使用两到三个特征即可获得与 MPP 相似的离线结果，但在线运行时，这还不足以重现 Icepack-Phys 的性能；要模拟并替代物理融池参数化，则需要 4 至6 个变量。

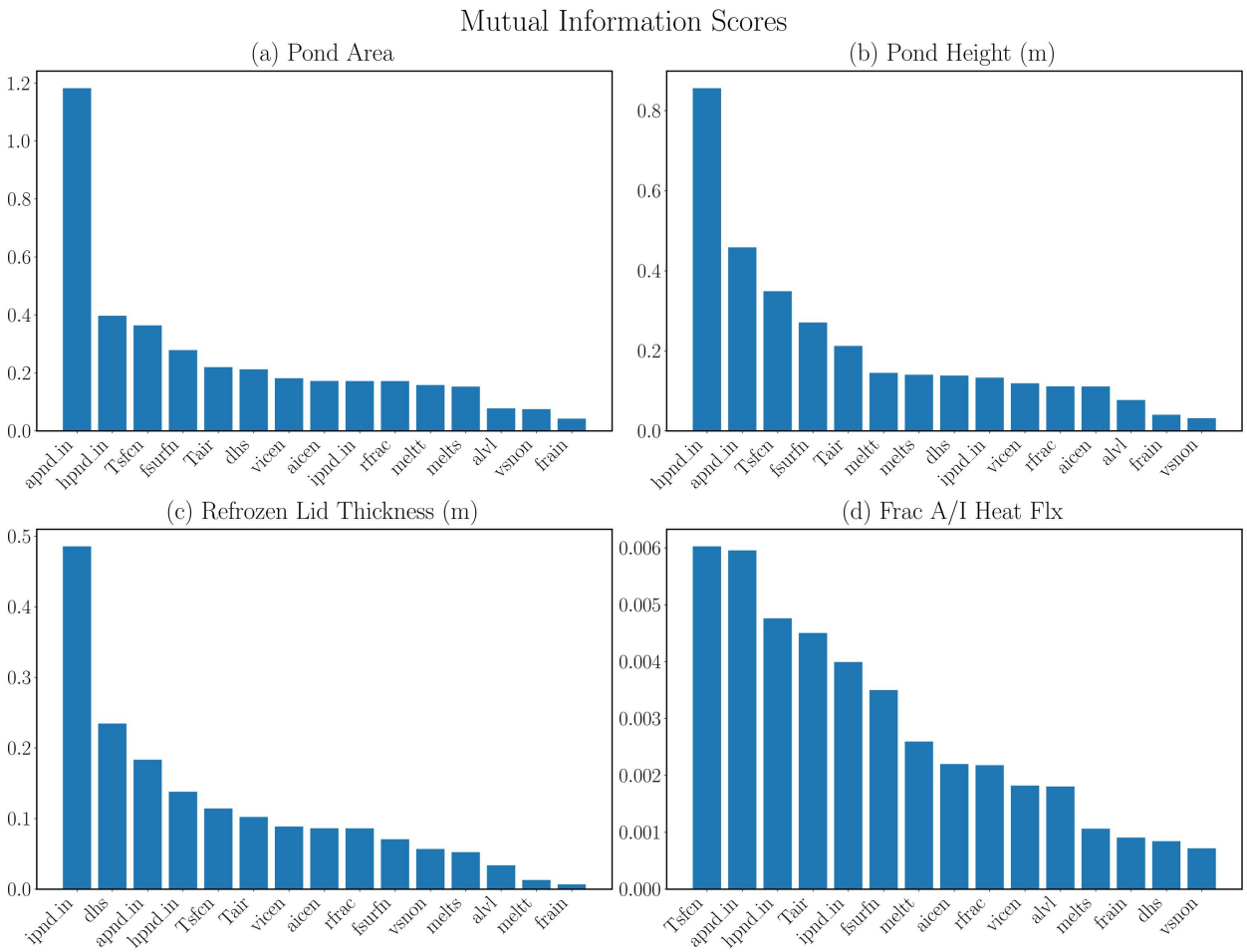

图10：基于互信息的特征选择——对于每个目标（apnd、hpnd、ipnd 和 ffrac），特征按照其互信息得分排序。关于每个输入变量的定义，请参见表3。

.

5 讨论与未来工作

通过改变海冰反照率，融池在调节北极地区的能量平衡方面发挥着核心作用[Polashenski 等人， 2012]。因此，融池参数化（MPP）已成为当今海冰模型中的关键组成部分[Flocco 等人， 2010, 2012]。然而，导致融池形成的多尺度过程尚未被完全理解，也无法全部在海冰模型中得到明确解析。如今，与气候模型中的大多数参数化一样，MPP 源自物理原理，并且通常还具有遵循物理与动力平衡的优点。然而，它们也往往存在参数过多的问题，即需要对大量不确定参数进行（可能同时）调节。在此背景下，如果模型对 MPP 中的参数表现出高度敏感性，还会产生进一步的复杂性；此时，准确确定这些参数至关重要，尽管这极其困难。

我们研究了一种已知的先进 MPP，即平整冰 MPP [Hunke 等人， 2013], 它包含在一个用于海冰热力学的典型一维先进模型 Icepack 中 [Hunke 等人，2021年b] 我们使用 Sobol 敏感性分析，对其对 MPP 参数的敏感性进行了定量考察 [Sobol， 2001]。结果表明，Icepack 对其 MPP 的敏感性非常高且不均匀。参数会显著影响 Icepack 的预测输出，在时间和空间上皆是如此。因此，即使 MPP 参数值仅有微小差异，也会导致 Icepack 的行为大不相同。Icepack 的响应不仅长期来看存在差异，还表现出强烈的地理依赖性。MPP 参数不可避免的不确定性，加上 MPP 本身对参数的高度敏感，可能会造成严重的海冰预测误差。

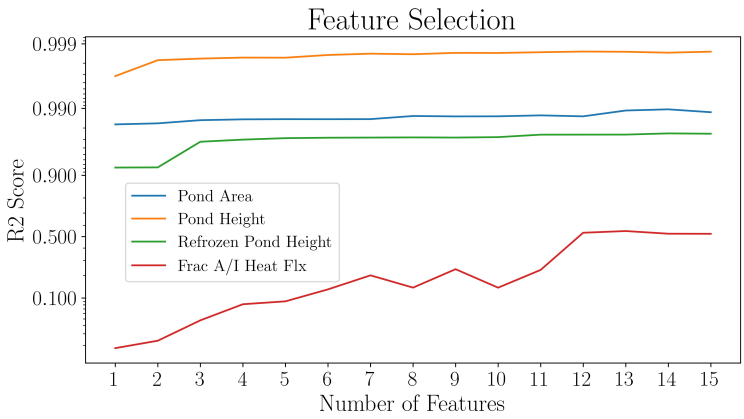

图 11：每个目标相对于训练中所包含特征数量的 R^2 分数。使用相同架构的神经网络训练 25 个周期，采用 $n = 1$、.....15 个特征，目标包括融池面积、融池高度、ipond 高度，以及用于融化冻结盖层的大气—海冰热通量比例。坐标轴采用对数刻度。

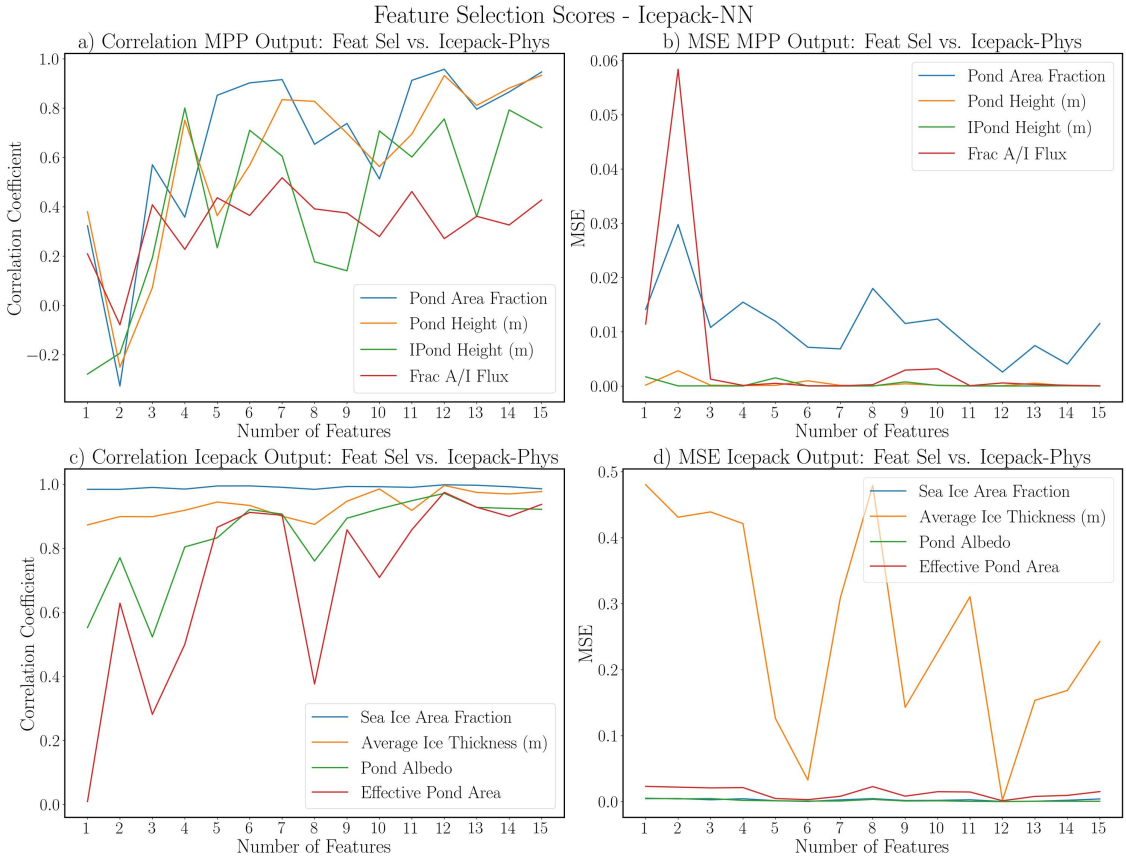

图 12 ：在线模拟的特征选择性能：MSE 和相关系数分数 .

因此，在本研究的第二部分，我们探讨了机器学习（ML），尤其是神经网络（NNs），是否能够（i）学习物理融池参数化（MPP）中的物理过程，以及（ii）能否使用比原始物理MPP所需更少的输入来实现这一点。研究表明，神经网络能够学习并模拟MPP。具体而言，尽管较简单的线性回归模型在一定程度上能够学习MPP中的输入到输出过程（离线模拟），但只有非线性神经网络才能在完整的Icepack中成功替代原始物理MPP（在线模拟）。相比之下，使用基于线性回归的MPP模拟器时，Icepack无法再现采用物理MPP的原始Icepack。

我们的结果表明，神经网络能够学习并构建可行的次网格尺度参数化，也表明精简、简单的数据驱动模拟器能够在Icepack模型中充当MPP。特征选择及相应训练得到的神经网络表明，融池参数化过于复杂，无法仅凭一个或两个特征实现成功的在线模拟；但使用少于物理MPP所需全部输入变量的特征仍可成功模拟。我们发现，若已知前一时间步的部分融池属性（融池面积分数、融池高度和再冻结盖层高度），以及近地表温度、空气温度和积雪融化速率等少数其他基本变量，模拟效果会有所提升。总之，我们的结果表明，在构建基于观测训练的模拟器时，温度等关键热力学变量、与质量守恒相关的可用融水变量（例如积雪融化速率），以及前一时间步的融池信息，可能都是关键因素。

在尝试模拟融池并替代现有参数化方案时，最终目标并非只是替换参数化方案，而是要对其加以改进。本研究是设计完全由数据驱动的融池参数化方案的第一步。我们的结果令人鼓舞，并表明，正如其他研究在气候模型的其他参数化方案中所展示的那样（例如，关于云的研究，见Krasnopolsky 等人 [2013的]研究），模拟器可以在区域和全球气候模型中替代融池参数化方案。下一步，我们将基于观测数据构建一个模拟器，并用它以数据驱动的参数化方案替代 Icepack模型中的参数化方案。我们预计面临的一项关键挑战是能否获得准确的原始数据。这里所说的准确性，是指数据在时空分布上的准确性、精度，以及其与所关注物理量的直接关联。我们设想采用近期开发的、结合数据同化与机器学习的方法；这些方法已显示出处理稀疏和含噪数据的能力 [Cheng 等人， 2023]。

6 致谢

作者感谢由 Schmidt Futures 资助的 SASIP 项目提供支持。Schmidt Futures 是一项慈善倡议，旨在通过发展新兴科学与技术来改善社会福祉。SD 感谢英国自然环境研究委员会地球观测数据获取与分析服务（NEODAAS）为本研究提供计算资源。SD 感谢 Clara Burgard 在搭建 Icepack模型方面提供的宝贵建议。SD 感谢 David Moffat 协助使用 NEODAAS 的地球观测大型GPU集群平台。CEREA 是皮埃尔-西蒙·拉普拉斯研究所的成员。作者声明不存在任何利益冲突。

参考文献

J. Alvarez、D. Yumashev 和 G. Whiteman。评估北极变化经济影响的框架。*Ambio*，49(2):407–418，2020年2月。ISSN 1654-7209（电子版）；0044-7447（印刷版）；0044-7447（关联）。doi: 10.1007/s13280-019-01211-z。R. Assaad 和 S. Fayek。利用计算计量经济学预测原油价格及其波动：深度学习、LSTM 和卷积神经网络。金融计量经济学研究，6:119–137，2021年9月。doi: 10.2478/erfin-2021-0006。J. Boé、A. Hall 和 X. Qu。预测到2100年北冰洋9月海冰覆盖将消失。自然地球科学，2(5):341–343，2009年。doi: 10.1038/ngeo467。网址https://doi.org/10.1038/ngeo467。J. Brajard、A. Carrassi、M. Bocquet 和 L. Bertino。结合数据同化与机器学习，通过稀疏且含噪的观测数据模拟动力学模型：以 Lorenz 96 模型为例。计算科学杂志，第44卷，2020年7月，101171，2020年。J. Brajard、A. Carrassi、M. Bocquet 和 L. Bertino。结合数据同化与机器学习，推断未解析尺度的参数化。英国皇家学会哲学汇刊*A*辑：数学、物理与工程科学，379(2194):20200086，2021年。doi: 10.1098/rsta.2020.0086。网址
https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsta.2020.0086。N. D. Brenowitz 和 C. S. Bretherton。神经网络统一物理参数化的预报验证。地球物理研究快报，第45卷第12期；6289–6298，2018年。O. Camburu。深度神经网络的解释。牛津大学博士论文，2020年。

G. Castellani, F. L. Schaafsma, S. Arndt, B. A. Lange, I. Peeken, J. Ehrlich, C. David, R. Ricker, T. Krumpen, S. Hendricks, S. Schwegmann, P. Massicotte, and H. Flores. 极地海洋中海冰物理和生物特性的大尺度变化。Frontiers in Marine Science, 7:536, 2020年。ISSN 2296-7745。doi: 10.3389/fmars. 2020.00536。URL https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fmars.2020.00536。M. Chantry, H. Christensen, P. Dueben, and P. T. 机器学习在天气和气候建模中的机遇与挑战：硬、适中和软人工智能。Phil. Trans. R. Soc., page A 379: 20200083., 2021年。S. Cheng, C. Quilodran-Casas, S. Ouala, A. Farchi, C. Liu, P. Tandeo, R. Fablet, D. Lucor, B. Iooss, J. Brajard, D. Xiao, T. Janjic, W. Ding, Y. Guo, A. Carrassi, M. Bocquet, and R. Arcucci. 动力系统中结合数据同化与不确定性量化的机器学习：综述，2023年。K. Dethloff, D. Handorf, R. Jaiser, A. Rinke, and P. Klinghammer. 北极放大的动力机制。Ann N Y Acad Sci, 1436(1):184–194, 2019年1月。ISSN 1749-6632 (Electronic); 0077-8923 (Linking)。doi: 10.1111/ nyas.13698。E. E. Ebert and J. A. Curry. 用于研究海冰—大气相互作用的中等复杂度一维海冰热力学模型。Journal of Geophysical Research, 98, 1993年6月。doi: 10.1029/93JC00656。URL https: //www.osti.gov/biblio/86406。D. Flocco and D. L. Feltham. 北极海冰上融池演化的连续介质模型。Journal of Geophys- ical Research: Oceans, 112(C8), 2007年。doi: https://doi.org/10.1029/2006JC003836。URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JC003836。D. Flocco, D. L. Feltham, and A. K. Turner. 将基于物理的融池方案纳入气候模型的海冰分量。Journal of Geophysical Research: Oceans, 115(C8), 2010年。doi: https://doi.org/10.1029/ 2009JC005568。URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JC005568。D. Flocco, D. Schroeder, D. L. Feltham, and E. C. Hunke. 融池对1990年至2007年北极海冰模拟的影响。Journal of Geophysical Research: Oceans, 117(C9), 2012年。doi: https://doi.org/10.1029/2012JC008195。URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2012JC008195。D. Flocco, D. L. Feltham, E. Bailey, and D. Schroeder. 北极海冰上融池的再冻结。Journal of Geophysical Research: Oceans, 120(2):647–659, 2015年。doi: https://doi.org/10.1002/2014JC010140。URL https: //agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2014JC010140。B. Frénay, G. Doquire, and M. Verleysen. 互信息是否适用于回归中的特征选择？Neural Networks, 48:1–7, 2013年。ISSN 0893-6080。doi: https://doi.org/10.1016/j.neunet.2013.07.003。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0893608013001883。M.-V. Guarino, L. C. Sime, D. Schröeder, I. Malmierca-Vallet, E. Rosenblum, M. Ringer, J. Ridley, D. Feltham, C. Bitz, E. J. Steig, E. Wolff, J. Stroeve, and A. Sellar. 末次间冰期期间无海冰的北极支持未来海冰快速消失的预测。Nature Climate Change, 10(10):928–932, 2020年。doi: 10.1038/s41558-020-0865-2。URL https: //doi.org/10.1038/s41558-020-0865-2。A. Hall. 表面反照率反馈在气候中的作用。Journal of Climate, 17(7):1550 – 1568, 2004年。doi: 10.1175/1520-0442(2004)017<1550:TROSAF>2.0.CO;2。URL https://journals.ametsoc.org/view/ journals/clim/17/7/1520-0442_2004_017_1550_trosaf_2.0.co_2.xml。J. Herman and W. Usher. SALib：用于敏感性分析的开源 Python 库。The Journal of Open Source Software, 2(9), 2017年01月。doi: 10.21105/joss.00097。URL https://doi.org/10.21105/joss.00097。M. Hofsteenge and L. Ganzeveld. 使用CICE进行一维和三维模拟的评估：SHEBA考察期间的海冰热力学与动力学。硕士论文，Researchgate，page 49, 2020年。doi: 10.5281/zenodo.4058189。URL https://www.researchgate.net/publication/344413884。M. M. Holland, D. A. Bailey, B. P. Briegleb, B. Light, and E. Hunke. CCSM4中改进的海冰短波辐射物理：融池和气溶胶对北极海冰的影响。Journal of Climate, 25(5):1413 – 1430, 2012年。doi: 10.1175/JCLI-D-11-00078.1。URL https://journals.ametsoc.org/view/journals/clim/25/ 5/jcli-d-11-00078.1.xml。T. Homma and A. Saltelli. 非线性模型全局敏感性分析中的重要性度量。Reliability Engineering & System Safety, 52(1):1–17, 1996年。ISSN 0951-8320。doi: https://doi.org/10.1016/0951-8320(96)00002-6。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0951832096000026。K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White. 多层前馈网络是通用逼近器。Neural Networks, 2(5):359–366, 1989年。ISSN 0893-6080。doi: https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0893608089900208。

E. Hunke、R. Allard、D. A. Bailey、P. Blain、A. Craig、F. Dupont、A. DuVivier、R. Grumbine、D. Hebert、M. Hol-land、N. Jeffery、J.-F. Lemieux、R. Osinski、T. Rasmussen、M. Ribergaard、A. Roberts、F. Roy、M. Turner 和 D. Worthen。CICE-Consortium/CICE：CICE 6.3.0版，2021年9月a。网址 https://doi.org/10.5281/zenodo.5423913。E. Hunke、R. Allard、D. A. Bailey、P. Blain、A. Craig、F. Dupont、A. DuVivier、R. Grumbine、D. Hebert、M. Hol-land、N. Jeffery、J.-F. Lemieux、R. Osinski、T. Rasmussen、M. Ribergaard、A. Roberts 和 M. Turner。CICE-Consortium/Icepack：Icepack 1.3.0版，2021年9月b。网址 https://doi.org/10.5281/zenodo.5423061。E. C. Hunke、D. A. Hebert 和 O. Lecomte。洛斯阿拉莫斯海冰模型CICE中的平整冰面融池。《Ocean Modelling》，71：26–42，2013年。ISSN 1463-5003。doi：https://doi.org/10.1016/j.ocemod.2012.11.008。网址 https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1463500312001680。北冰洋。H. P. Huntington、A. Zagorsky、B. P. Kaltenborn、H. C. Shin、J. Dawson、M. Lukin、P. E. Dahl、P. Guo 和 D. N. Thomas。北冰洋变化的社会影响。《Ambio》，51(2)：298–306，2022年。doi：10.1007/ s13280-021-01601-2。网址 https://doi.org/10.1007/s13280-021-01601-2。F. Hutter、H. Hoos 和 K. Leyton-Brown。一种评估超参数重要性的高效方法。载于：E. P. Xing 和 T. Jebara（编），《第31届国际机器学习会议论文集》，《机器学习研究论文集》第32卷，第754–762页，中国北京，2014年6月22–24日。PMLR。网址 https://proceedings.mlr.press/v32/hutter14.html。K. Kashinath、M. Mustafa、A. Albert、J.-L. Wu、C. Jiang、S. Esmaeilzadeh、K. Azizzadenesheli、R. Wang、A. Chat-topadhyay、A. Singh、A. Manepalli、D. Chirila、R. Yu、R. Walters、B. White、H. Xiao、H. A. Tchelepi、P. Marcus、A. Anandkumar、P. Hassanzadeh 和 n. Prabhat。物理信息机器学习：天气和气候建模案例研究。《Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences》，379(2194)：20200093，2021年。doi：10.1098/rsta.2020.0093。网址 https://royalsocietypublishing. org/doi/abs/10.1098/rsta.2020.0093。V. M. Krasnopolsky。神经网络在地球系统科学中的应用。Springer，Dordrecht，第145–180页，2013年b)。V. M. Krasnopolsky、M. S. Fox-Rabinovitz 和 A. A. Belochitski。利用神经网络集合，从云解析模型模拟的数据中学习随机对流参数化方案，以用于气候和数值天气预报模型。《Advances in Artificial Neural Systems》，第1–13页，文章编号485913，2013年a)。B. Krawczyk。从不平衡数据中学习：未解决的挑战与未来方向。《Progress in Artificial Intelligence》，5(4)：221–232，2016年。doi：10.1007/s13748-016-0094-0。网址 https://doi.org/10.1007/s13748-016-0094-0。R. Kwok。北极海冰厚度、体积和多年冰覆盖范围：损失与耦合变率（1958–2018）。《Environmental Research Letters》，13(10)：105005，2018年10月。doi：10.1088/1748-9326/aae3ec。网址 https://doi. org/10.1088/1748-9326/aae3ec。L. Li、K. Jamieson、G. DeSalvo、A. Rostamizadeh 和 A. Talwalkar。Hyperband：一种用于超参数优化的新型基于多臂赌博机的方法，2018年。Q. Li、C. Zhou、L. Zheng、T. Liu 和 X. Yang。利用光学卫星数据监测加拿大北极群岛一年冰和多年冰上融池的演变。《Annals of Glaciology》，61(82)：154–163，2020年。doi：10.1017/aog.2020.24。S. Manabe 和 R. J. Stouffer。大气中CO2浓度增加对全球气候模型的敏感性。《Journal of Geophysical Research: Oceans》，85(C10)：5529–5554，1980年。doi：https://doi. org/10.1029/JC085iC10p05529。网址 https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JC085iC10p05529。D. Menemenlis、J.-M. Campin、P. Heimbach、C. Hill、T. Lee、A. Nguyen、M. Schodlok 和 H. Zhang。ECCO2：高分辨率全球海洋和海冰数据综合。《Mercator Ocean Quarterly Newsletter》，31(October)：13–21，2008年。P. A. O'Gorman 和 J. G. Dwyer。利用机器学习对湿对流进行参数化：在气候、气候变化和极端事件建模中的潜力。《Journal of Advances in Modeling Earth Systems》，第10卷第10期，第2548–2563页，2018年。D. K. Perovich、T. C. Grenfell、B. Light 和 P. V. Hobbs。多年北极海冰反照率的季节性演变。《Journal of Geophysical Research: Oceans》，107(C10)：SHE 20–1–SHE 20–13，2002年。doi：https://doi.org/10.1029/ 2000JC000438。网址 https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000JC000438。C. Polashenski、D. Perovich 和 Z. Courville。海冰融池形成与演变的机制。《Journal of Geophysical Research: Oceans》，117(C1)，2012年。doi：https://doi.org/10.1029/2011JC007231。网址 https: //agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2011JC007231。

S. Rasp、M. S. Pritchard 和 P. Gentine。利用深度学习表示气候模型中的次网格过程。《EARTH, ATMOSPHERIC, AND PLANETARY SCIENCES》，第115卷（39），9684–9689页，2018年。S. Saha、S. Moorthi、X. Wu、J. Wang、S. Nadiga、P. Tripp、D. Behringer、Y.-T. Hou、H.-Y. Chuang、M. Iredell、M. Ek、J. Meng、R. Yang、M. Peña、H. Dool、Q. Zhang、W. Wang、M. Chen 和 E. Becker。NCEP气候预报系统第二版。《Journal of Climate》，27：2185–2208，2014年3月。A. Saltelli。充分利用模型评估来计算敏感性指数。《Computer Physics Communications》，145(2)：280–297，2002年。ISSN 0010-4655。doi：https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00280-1。网址 https: // www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465502002801。A. Saltelli、S. Tarantola、F. Campolongo 和 M. Ratto。《实践中的敏感性分析：科学模型评估指南》。Wiley，1：232，2004年。ISSN 978-0-470-87093-8。doi：https://www.wiley.com/en-gb/。A. Saltelli、M. Ratto、T. Andres、F. Campolongo、J. Cariboni、D. Gatelli、M. Saisana 和 S. Tarantola。《全局敏感性分析：入门指南》。Wiley，2008年。ISBN 978-0-470-05997-5。M. C. Serreze、A. P. Barrett、A. G. Slater、M. Steele、J. Zhang 和 K. E. Trenberth。北极的大尺度能量收支。《Journal of Geophysical Research: Atmospheres》，112(D11)，2007年。doi：https://doi.org/10.1029/ 2006JD008230。网址 https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD008230。F. Sévellec、A. V. Fedorov 和 W. Liu。北极海冰减少会削弱大西洋经向翻转环流。《Nature Climate Change》，7(8)：604–610，2017年。doi：10.1038/nclimate3353。网址 https://doi.org/10.1038/ nclimate3353。C. E. Shannon。通信的数学理论。《The Bell System Technical Journal》，(379–423)：27，1948年。I. Sobol。非线性数学模型的敏感性分析。《Mathematical Modelling and Computational Experiment》，1：407–414，1993年。I. Sobol。非线性数学模型的全局敏感性指数及其蒙特卡洛估计。《Mathematics and Computers in Simulation》，55(1)：271–280，2001年。ISSN 0378-4754。doi：https://doi.org/10.1016/S0378-4754(00) 00270-6。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378475400002706。第二届IMACS蒙特卡洛方法研讨会。M. Solan、P. Archambault、P. E. Renaud 和 C. März。变化中的北冰洋：对生物群落、生物地球化学过程和生态系统功能的影响。《Philos Trans A Math Phys Eng Sci》，378(2181)：20200266，2020年10月。ISSN 1471-2962（电子版）；1364-503X（印刷版）；1364-503X（关联版）。doi：10.1098/rsta. 2020.0266。J. C. Stroeve、M. C. Serreze、M. M. Holland、J. E. Kay、J. Malanik 和 A. P. Barrett。北极海冰覆盖范围迅速缩小：研究综述。《Climatic change》，110(3)：1005–1027，2012年。S. Takahashi、T. Kosugi 和 H. Enomoto。日本北海道沿岸海冰范围的变化：地球上纬度最低的海冰出现区域及其与气候变化的关系。《Annals of Glaciology》，52(58)：165–168，2011年。doi：10.3189/172756411797252301。Y. Tang、P. Reed、T. Wagener 和 K. van Werkhoven。比较敏感性分析方法，推进集总式流域模型的识别与评估。《Hydrology and Earth System Sciences》，11(2)：793–817，2007年。doi：10.5194/hess-11-793-2007。网址 https://hess.copernicus.org/articles/11/793/2007/。J. J. Thiagarajan、B. Venkatesh、R. Anirudh、P.-T. Bremer、J. Gaffney、G. Anderson 和 B. Spears。利用校准驱动的深度模型为科学过程设计精确模拟器。《Nature Communications》，11(1)：5622，2020年。doi：10.1038/s41467-020-19448-8。网址 https://doi.org/10.1038/s41467-020-19448-8。A. Turner、E. Hunke 和 C. Bitz。海冰重力排水的两种模式：一种用于大尺度建模的参数化方案。《Journal of Geophysical Research: Oceans》，118，2013年5月。doi：10.1002/jgrc.20171。J. R. Urrego-Blanco、N. M. Urban、E. C. Hunke、A. K. Turner 和 N. Jeffery。洛斯阿拉莫斯海冰模型的不确定性量化与全局敏感性分析。《Journal of Geophysical Research: Oceans》，121(4)：2709–2732，2016年。doi：https://doi.org/10.1002/2015JC011558。网址 https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/ abs/10.1002/2015JC011558。M. Wang 和 J. E. Overland。30年内北极会出现无海冰夏季吗？《Geophysical Research Letters》，36(7)，2009年。doi：https://doi.org/10.1029/2009GL037820。网址 https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/ abs/10.1029/2009GL037820。W. Weeks。《论海冰》。阿拉斯加大学出版社，2010年。