GFDセミナー特別編2024 2024/03/16

ISPACKの開発とその大気力学研究への応用

石岡圭一 (京大・理・地惑)

E-mail: ishioka@gfd-dennou.org

ISPACK開発の契機と、林先生との御縁のふりかえり

4回生で余田先生の下で卒論研究をスタートし(1989年), そこで, 球面のスペクトル法の勉強を, 気象庁予報部電子計算機室報告・別冊第28号「スペクトル法による数値予報(その原理と実際)」(金光正郎・佐藤信夫・伊佐真好・工藤達也, 1982)で勉強することから始めた.当時, 山田先生も防災研にいらっしゃって, 御助言をいただいた.その後, 余田先生と山田先生が, 球面のスペクトル法を使った減衰性2次元乱流の論文, Yoden and Yamada (1993), を出版される.

私自身は,4回生の頃から,自分で FFTから書き始め,M1の頃にはそれなり に使える球面のスペクトル法の変換プログラムを作って,それを用いて,帯 状流の安定性に関する修論研究,D論研究をやり始めていた.当時は,京大 のスパコンは富士通のベクトル計算機 VP400E (1.4GFLOPS) とか, VP2600 (5GFLOPS)とかだった.私のプログラムも,ひたすら「ベクトル長を長く する」ということだけ考えたプログラムだった. その当時,気象学会の力学のセッションで発表するたび,林先生から常に建設的なコメントをいただいていた.また院生の頃に,気象研究ノート156号「ロスビー波」の中の林先生の名著「二次元ロスビー波の線形論」(林,1987)を読んで,感銘を受けていた.

その後,京大で博士をとって(1995年),東大数理にいらっしゃった山田先生 に学振PDで受け入れてもらう.そこに林先生もいらっしゃって,計算機環 境も含め,大変お世話になり,GFD電脳倶楽部の活動にもそれ以来,巻き込 んでいただいた.

それまで開発してきていた球面調和関数変換のライブラリをOSSとして整備・公開することを林先生に勧められ,それが ISPACKの整備につながった. ispack-0.0のリリースが 1997年4月15日.また,当時,林先生の下に豊田 英司さん(現・気象庁)がいらっしゃって,ライセンスのありかたについて高 みから解説して下さっていたので,その影響があり,LGPLを採用した次第. ということで, ISPACKのある意味, 「プロデューサー」は林先生と言って も過言ではない.

また、東大数理には、林さんが組織した nettomo/uttomoという手練の猛者 達(例えば,現・京大数学の教授の加藤周さん,現・東大情報システム本部 講師の中村誠さん,現・筑波大学計算科学研究センター教授の額田彰さん, 等々)が(当時は学生として)いて、そこでいろいろ教わった. 私に Debian を紹介してくれたのは、確か中村誠さん、それで電脳サーバー達は、私が Debianに改宗したことによって、今でも Debianで動いている(それまでは、 私は Slackware 使っていた). ちなみに, Debian な電脳サーバーは, 1999年 に Pentium3 550MHz なCPUのマシンでスタートした(UMAXの筐体だっ た). ちなみに, 当時の Debian は Slink. 当時, nettomo/uttomoの人々に出会 わなければ、サーバー管理とかとは無縁の人生を歩んでいたかも. Linux は 使い続けていたと思うけど.

というわけで、ISPACKは、林先生なしでは存在しえなかったということで、 今日は、林先生への感謝も込めて、ISPACKの高速化の核心となっている、 Ishioka (2018)で開発した漸化式の話や、ISPACKの応用例の一つとしての 3次元スペクトル法の大気力学コアの話(Ishioka, et al., 2022)、および、それ から派生した、Pekeris波の等価深度の見積りの話(Ishioka, 2023; Ishizaki, et al., 2023) などについて紹介する. Ishioka, K., 2018:

A new recurrence formula for efficient computation of spherical harmonic transform. *JMSJ*, **96**, 241–249.

に関する話題.

球面のスペクトル法のざっくりとしたレビュー

従属変数を球面調和関数で展開.

$$f(\lambda,\mu,t) = \sum_{n=0}^{M} \sum_{m=-n}^{n} a_n^m(t) Y_n^m(\lambda,\mu).$$

 λ : 経度, $\mu = \sin \theta$, θ : 緯度, t: 時刻, M: 切断波数.

 $Y_n^m(\lambda,\mu) = P_n^{|m|}(\mu)e^{im\lambda}.$

 $P_n^m(\mu)$: Legendre 陪関数.

$$P_n^m(\mu) \equiv \sqrt{(2n+1)\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\frac{1}{2^n n!}} \times (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{d\mu^{n+m}} (\mu^2-1)^n \quad (0 \le m \le n).$$

Legendre 陪関数による展開

球面調和関数展開では、以下のLegendre陪関数による展開に最も計算コストがかかる.

逆変換:

$$g_j^m = \sum_{n=m}^M s_n^m P_n^m(\mu_j) \quad (m = 0, \cdots, M; \ j = 1, \cdots, J).$$

正変換:

$$s_n^m = \sum_{j=1}^J w_j g_j^m P_n^m(\mu_j) \quad (m = 0, \cdots, M; \ n = m, \cdots, M).$$

J: ガウス緯度の個数, μ_j : ガウス緯度, w_j : ガウス重み.

必要な計算量

Legendre 陪関数の $m \ge 1$ の成分に対しては実部・虚部を扱わねばなら ないことと, ルジャンドル陪関数の対称性から添字jに関する計算は半分の J/2でよいことを考慮すると, 逆変換・正変換に必要な計算量はNはルジャ ンドル陪関数をすべて事前に計算しておくとしても(乗算と加算が必要なこ とを考慮して)

$$N = \frac{J}{2} \cdot (M+1)^2 \cdot 2 = J(M+1)^2.$$

さらに, 正変換時の数値計算で誤差が出ないことを保証するためには $J > \frac{3}{2}M$ としておく必要があるので,

$$N \sim \frac{3}{2}M^3$$

*M*が大のときは,この変換計算をいかに効率化するかが全体の計算スピー ドを決める. x64 な CPU上(というか, ベクトル機でない普通のCPU)での最適化

今日, x64 な CPU が広く普及しているので, コードをそれに合わせてチ ューンしておくことは有意義.

x64 な CPUはメモリバンド幅が狭いので, キャッシュの活用が重要.

しかし、Legendre陪関数変換を素朴に実装すると、行列×ベクトル型の演算になるので、キャッシュに載りにくい.

→ 解決策: Legendre 陪関数を変換と同時に計算する.

ただし, Legendre 陪関数を計算する計算量は変換そのものの計算量と同じ オーダー. なので, Legendre 陪関数の計算コストを下げられる工夫が可能 ならやるべき.

Legendre 陪関数は, 普通, 以下の漸化式で計算される.

$$P_{n+1}^{m}(\mu) = (\mu P_n^{m}(\mu) - \epsilon_n^{m} P_{n-1}^{m}(\mu)) / \epsilon_{n+1}^{m}$$

$$\epsilon_n^{m} = \sqrt{(n^2 - m^2)/(4n^2 - 1)}.$$

この漸化式を1回計算するには, ϵ_n^m および $1/\epsilon_n^m$ を事前に計算しておくと すれば, 乗算3回と減算1回(積和算としてカウントすると3回).

Ishioka (2018)では 変換の式および漸化式を工夫することによって,漸化 式部分のコストを削減した. 積和算命令にも馴染むものにした(1段あたり 実質積和算1回). 最初は, Clenshawの漸化式みたいのが使えないかと思っていた. すなわち, 例えば逆変換の方の計算:

$$g_j^m = \sum_{n=m}^M s_n^m P_n^m(\mu_j)$$

は,漸化式

$$P_{n+1}^{m}(\mu) = (\mu P_{n}^{m}(\mu) - \epsilon_{n}^{m} P_{n-1}^{m}(\mu)) / \epsilon_{n+1}^{m}$$

と組み合わせると、以下のように計算できる(上付き添字のmは省略).

$$y_{M} = s_{M},$$

$$y_{M-1} = (\mu_{j}/\epsilon_{M})y_{M} + s_{M-1},$$

$$y_{n} = (\mu_{j}/\epsilon_{n+1})y_{n+1} - (\epsilon_{n+1}/\epsilon_{n+2})y_{n+2} + s_{n}$$

$$(n = M - 2, M - 3, \dots, m + 1)$$

を計算し,

$g_j = y_{m+1}P_{m+1} + (s_m - (\epsilon_{m+1}/\epsilon_{m+2})y_{m+2})P_m$

とすれば, g_j が求まる. このアルゴリズムだと, 漸化式の計算と逆変換が, n一段あたり, 乗算3回, 加算2回で済むので, 漸化式と逆変換を素朴にやるの に比べると, 乗算が1回省略できている勘定にはなる. 積和算という意味で も3回でできるので, 積和算1回分は得. ただし, 展開係数の実部虚部を考 えると, P_n の漸化式と逆変換をClenshawの漸化式でまとめても得になら ない(むしろ P_n が陽に求まらないので計算量増える).

ということで,漸化式自体の計算量を減らせないかということを考えて, IS-PACK1の頃は,次にあげる手法の前身となるアルゴリズムで,漸化式1段あ たり乗算2回,加算1回には減らせていた(積和算でカウントすると,3回に だったものが2回).ただ,今一つな感じだったが,次のページ以降のアルゴ リズムを「発見」して効率化された. 元々の漸化式(以下,ごちゃごちゃするので,上付き添字mは省略)

$$\mu P_{n}(\mu) = \epsilon_{n+1} P_{n+1}(\mu) + \epsilon_{n} P_{n-1}(\mu)$$

を2段階組み合わせると,

 $\mu^{2} P_{n}(\mu) = \epsilon_{n+1} \epsilon_{n+2} P_{n+2}(\mu) + \{(\epsilon_{n+1})^{2} + (\epsilon_{n})^{2}\} P_{n}(\mu) + \epsilon_{n} \epsilon_{n-1} P_{n-2}(\mu)$

となる. 赤道反対称のLegendre 陪関数について考えて,n = m + 2l + 1 (l = 0, 1, ...)とすると,上の漸化式は,

$$\mu^{2}P_{m+2l+1}(\mu) = \epsilon_{m+2l+2}\epsilon_{m+2l+3}P_{m+2l+3}(\mu) + \{(\epsilon_{m+2l+2})^{2} + (\epsilon_{m+2l+1})^{2}\}P_{m+2l+1}(\mu) + \epsilon_{m+2l+1}\epsilon_{m+2l}P_{m+2l-1}(\mu),$$

と表せる. ここで,

 $P_{m+2l+1}(\mu) = \mu \alpha_l p_l(\mu),$

と p_l を導入すれば,

$$\mu^{2} \alpha_{l} p_{l}(\mu) = \epsilon_{m+2l+2} \epsilon_{m+2l+3} \alpha_{l+1} p_{l+1}(\mu) + \{(\epsilon_{m+2l+2})^{2} + (\epsilon_{m+2l+1})^{2}\} \alpha_{l} p_{l}(\mu) + \epsilon_{m+2l+1} \epsilon_{m+2l} \alpha_{l-1} p_{l-1}(\mu),$$

となる.この漸化式を簡単にするために、 α_l に対して

 $\epsilon_{m+2l+2}\epsilon_{m+2l+3}\alpha_{l+1} = -\epsilon_{m+2l+1}\epsilon_{m+2l}\alpha_{l-1},$

を満すことを課す. この式の両辺に α_l を掛けて変形すると, $\alpha_{l+1}\alpha_l = -\frac{\epsilon_{m+2l+1}\epsilon_{m+2l}}{\epsilon_{m+2l+3}\epsilon_{m+2l+2}}\alpha_l\alpha_{l-1},$

を得る.この式を繰り返し適用すると,

$$\alpha_{l+1}\alpha_l = (-1)^l \frac{\epsilon_{m+3}\epsilon_{m+2}}{\epsilon_{m+2l+3}\epsilon_{m+2l+2}} \alpha_1\alpha_0,$$

を得る. 従って, あとは α_0 と α_1 を定めさえすれば, 順次, α_l (l = 2, 3, ...) を定めることができる. *α*₀ と *α*₁ の 定めかたには 任 意性があるが, 後々の 便利のため, 以下のように 定めることにする.

$$\alpha_0 = \frac{1}{\epsilon_{m+1}}, \ \alpha_1 = \frac{\epsilon_{m+1}}{\epsilon_{m+2}\epsilon_{m+3}}.$$

こう定めると,結局,

$$\alpha_{l+1}\alpha_l = \frac{(-1)^l}{\epsilon_{m+2l+3}\epsilon_{m+2l+2}}.$$

となる. 先の $p_l(\mu)$ に対する漸化式の両辺に $(-1)^l lpha_l$ を掛けて, 上の式を用いると,

$$p_{l+1}(\mu) = \left[(-1)^l (\alpha_l)^2 \mu^2 - (-1)^l (\alpha_l)^2 \left\{ (\epsilon_{m+2l+2})^2 + (\epsilon_{m+2l+1})^2 \right\} \right] p_l(\mu) + p_{l-1}(\mu).$$

となる.

さらに、 a_l と b_l を

 $a_l = (-1)^l (\alpha_l)^2, \quad b_l = -a_l \left\{ (\epsilon_{m+2l+2})^2 + (\epsilon_{m+2l+1})^2 \right\},$

と導入すれば、結局、 $p_l(\mu)$ に対する漸化式

 $p_{l+1}(\mu) = (a_l \mu^2 + b_l) p_l(\mu) + p_{l-1}(\mu).$

が得られる.この漸化式においては, $a_l \ge b_l$ および μ^2 を前もって計算し ておけば,漸化式一段あたり,2回の積和算(乗算2回,加算2回) で計算でき る.この漸化式は元の P_n で考えれば, $n \ge 2$ つ増す漸化式に相当するので, nの一段あたり,1回の積和算で済んでいて,元々の3回の積和算の必要性に 比べて,計算量が 1/3 になることになる. ただし、このnについて2つずつ増える漸化式を $P_n(\mu)$ の偶奇モード両方 について計算していては全く意味が無い(むしろ以前のアルゴリズムの方が 速いことになる)ので、どちらか一方についてのみ計算することになる. 実 際には、 $\mu = 0$ 付近の精度を考えて、奇モードのみについて計算する.

隅モードについては,

 $\mu P_n(\mu) = \epsilon_{n+1} P_{n+1}(\mu) + \epsilon_n P_{n-1}(\mu)$

を用いて,2つの奇モードの重ね合わせ(の1/µ)として計算できる.

このアルゴリズムを利用することの副産物として, 乗算の削減だけでなく, Legendre陪関数に関するロードとストアが半分で済むので, その分のコス ト削減にもつながる. 実際には, 例えば, 逆変換は以下のように計算される.

$$g_{j} = \sum_{l=0}^{\left[\frac{M-m}{2}\right]} (t_{l}\alpha_{l})p_{l}^{m}(\mu_{j}) + \mu_{j} \sum_{l=0}^{\left[\frac{M-m-1}{2}\right]} (s_{m+2l+1}\alpha_{l})p_{l}^{m}(\mu_{j}).$$

 $\zeta \zeta l\zeta,$

$$t_{l} = \begin{cases} s_{m+2l}\epsilon_{m+2l+1} + s_{m+2l+2}\epsilon_{m+2l+2} & (l = 0, 1, \dots, [\frac{M-m}{2}] - 1) \\ s_{m+2l}\epsilon_{m+2l+1} & (l = [\frac{M-m}{2}]). \end{cases}$$

その他の工夫:

論文では, *m*が大きい場合に生じるアンダーフローの回避の手法について も提案している. また, ISPACK3の実装では, 変換のホットスポット部分は アセンブリ言語で書くなどもして高速化している. 比較対象: SHTns

作者: Nathanaël Schaeffer (ISTerre, Université de Grenoble)

URL: http://users.isterre.fr/nschaeff/SHTns/

論文: Schaeffer(2013): Efficient spherical harmonic transforms aimed at pseudospectral numerical simulations, *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, vol. 14, pp.751–758.

開発履歴: Changelog を見ると, 2010年に v1.0 がリリースされていたようだ. 現在は v3.6.6 (2024年2月29日リリース) (ただし, 以下にでてくる ベンチマーク結果は, v3.4.6 (2021年5月15日リリース)を用いたもの)

※実装の方向性は私のものに非常に近い(Legendre 陪関数を on-the-fly で 計算するとか, SIMD命令の活用とか). SHTns も, v3.2-r660 以降では, "New recurrence formula of Ishioka (2018) leading to faster transforms, especially for large sizes. see https://doi.org/10 019" として私の手法が取り入れられているので, それとの比較も入れる. 以前は, configure 時に –enable-ishioka というスィッチをオプションを付 けてから make する必要があったが, 今は(v3.4以降) そちらがデフォルト になっている. 従って, あえて –disable-ishioka というスィッチを有効にし た場合とも比較しておく. ベンチマーク結果(AVX2)

プラットホーム:

CPU: Broadwell Xeon E5-2699v4 ($22 \exists \mathcal{T}$)×2

コンパイラ: ifort 19.0.0.117 -xHost -qopenmp -align array64byte (SHTns は, gcc 6.3.0, option -O2 -march=native -ffast-math) 44 スレッドの場合のみを示す.

スペクトル⇔格子点値 1回あたりの変換にかかる時間(sec) (SHTns' は, SHTnsを –disable-ishioka で makeした場合).

	M =	1023	M = 2047		
	bwd	fwd	bwd	fwd	
SHTns'	0.0021	0.0022	0.014	0.015	
SHTns	0.0015	0.0015	0.0097	0.0098	
ISPACK3	0.0017	0.0014	0.011	0.0094	

	M = 4095		M = 8191		M = 16383	
	bwd	fwd	bwd	fwd	bwd	fwd
SHTns'	0.11	0.11	0.86	0.86	7.4	7.3
SHTns	0.070	0.071	0.53	0.52	4.5	4.3
ISPACK3	0.075	0.064	0.53	0.45	4.0	3.4

ベンチマーク結果その2(AVX512)

プラットホーム:

CPU: Skylake-W Xeon W-2135 (3.7GHz, 6コア)

コンパイラ: ifort 19.1.3.304 -xHost -qopenmp -align array64byte (SHTns

は, gcc 8.3.0, option -O2 -march=native -ffast-math)

6スレッドの場合のみを示す.

スペクトル⇔格子点値 1回あたりの変換にかかる時間(sec)

	M =	1023	M = 2047		
	bwd	fwd	bwd	fwd	
SHTns	0.0044	0.0044	0.033	0.033	
ISPACK3	0.0048	0.0045	0.029	0.027	

	M = 4095		M = 8191		M = 16383	
	bwd	fwd	bwd	fwd	bwd	fwd
SHTns	0.20	0.19	1.6	1.5	11.0	10.9
ISPACK3	0.18	0.18	1.3	1.3	9.9	9.6

インパクト:

Ishioka (2018)で提案した漸化式は,上で紹介した SHTns だけでなく,他の開発者の球面調和関数変換ライブラリにも既に利用されている. cf. libsharp2 by Martin Reinecke (https://gitlab.mpcdf.mpg.de/mtr/libsharp/). そこでは, "This update features significant speedups thanks to important algorithmic discoveries by Keiichi Ishioka と謝辞を書いてもらっている.

ということで、GFD電脳倶楽部の方向性としても、それなりにインパクト のある仕事ができたかなと思っている. また, SHTnsは, READMEの中で, "If you use Ishioka's recurrence (the default since SHTns v3.4), you may also want to cite his paper:"として, Ishioka (2018)の文献情報を入れてく れているので、SHTnsを利用して成果を出した論文が出ると、ほぼ自動的に Ishioka (2018)も引用してくれるのでありがたい. 特に, SHTnsは, MagIC (https://github.com/magic-sph/magic)というダイナモコードで使われてい るので,ダイナモ業界の論文でも**lshioka** (2018)を引用してもらっている.

Ishioka, K., N. Yamamoto, and M. Fujita, 2022: A Formulation of a three-dimensional spectral model for the primitive equation. *JMSJ*, **100**, 445–469.

に関する話題.

プリミティブ方程式系に対する3次元スペクトル法の定式化

プリミティブ方程式系にもとづく静力学全球大気モデルは,水平方向の離 散化に球面調和関数展開のスペクトル法を用いているものが多いが,鉛直 方向は主に差分法が使われている.

鉛直方向にもスペクトル法を使う, 3次元スペクトル法のモデルの定式化について, 山本直人君(2016年度修士論文), 藤田雅人君(2019年度修士論文)で取り組んでもらったが, それらの結果と, 私が追加した計算結果や, 傾圧トイモデルの定式化などの内容も含めて, Ishioka, et al. (2022)として論文にまとめたので, それに沿って話をしていく.

開発の動機: 修士課程以降, ISPACK(およびその前身)を使って, 球面上の2 次元流体(順圧/浅水)の不安定や乱流の研究を自分自身, および学生さん達 といろいろやってきていたが, さすがに3次元の話がやりたくなっていた.

修論研究の学生さん(永井君)の修論(2018年度)として, 独自に球殻対流の 3次元スペクトル法の実装(動径方向に普通と違って Legendre 多項式を用 いる)はやってみてもらったことはあったが, 地球大気を念頭に置いた, プ リミティブ方程式系のものを独自にちゃんと実装したくなった.

球面上のプリミティブ方程式系の実装として,水平方向にスペクトル法,鉛 直方向には差分法というものが世の中のスタンダードで,DCPAMも含め て,ソースが公開されているものも昔から多数存在している.

ということで, 折角新しいものをスクラッチから作るなら, 普通と違うもの を作ってみたかった. そこで, プリミティブ方程式系で, 鉛直方向にもスペ クトル法を使う実装ができないかということでスタートした. このような試みは, 沢山ありそうな気がするのだが, 調べてみると, 意外 とあまり無くて, 鉛直方向に Legendre 多項式展開を用いた Machenhauer and Daley (1974)と, Chebyshev多項式展開を用いた黒木・村上 (2015)く らいしか見つからなかった.

どちらの先行研究も $\sigma = p/p_s$ 座標のプリミティブ方程式系を対象として いるが(pは圧力, p_s は地表面圧力), Machenhauer and Daley (1974)では $\sigma \rightarrow 0$ での特異性(後述)の扱いは提案はあるもののアドホックであり, ま た, 黒木・村上 (2015)ではその考察が無い. また, 時代的に, 当然ながら現 代的なベンチマーク計算などはやらておらず, 水平切断波数9(平行四辺形 切断), 鉛直の切断の次数5の計算のみ. 黒木・村上 (2015)では, 現代的なベ ンチマーク計算も行われているが, 特異性の回避などに関する考察は無い. 何が問題?

支配方程式の中に現れる,静力学平衡の式を鉛直積分した形の式:

$$\Phi' = \Phi'_s - \int_1^\sigma \frac{\tau'(\lambda, \mu, \sigma', t)}{\sigma'} d\sigma'.$$

において, τ' を普通に σ 方向にLegendre 多項式展開していると, $\sigma \to 0$ で 右辺が対数発散する. さらに, 右辺の積分結果に対数関数を含むようにな るため, 変換法を使った場合にエイリアスエラーを除去できなくなる. ここ で, λ は経度, μ はサイン緯度, Φ' はジオポテンシャルの擾乱成分, Φ'_s は地 表のジオポテンシャルの擾乱成分, τ' は温度場の擾乱成分. どちらも無次元 化されている.

問題解決へのアイディア:

また,発散場・渦度場は,単に $P_n(\eta)$ で展開する.このような定式化によって, τ' の時間発展部分だけは余分に5重対角行列を係数とする連立一次方程 式を解く手間が増えるが,コスト的には大したことはない.ちゃんとガラー キン法で定式化することによって,Semi-implicit法を適用する際に現れる 行列が対称行列になるなど,諸々,とても美しく定式化される. Held and Suarez (1994)のベンチマーク設定の計算の例(水平切断波数T85, 鉛直方向切断次数13, 鉛直方向グリッド数20) (Ishioka, et al. (2022) Fig. 2)



1000日間平均の帯状平均温度場(上パネル)および風速場(下パネル).

Jablonowski and Williamson (2006)のテストケース設定(ただし, 初期擾 乱を1/1000にしている)の計算の例(水平切断波数T85, 鉛直方向切断次数 170, 鉛直方向グリッド数256) (Ishioka, et al. (2022) Fig. 5)



時間発展の19日目の地表面気圧場.

Jablonowski and Williamson (2006)のテストケース設定(ただし, 初期擾 乱を1/1000にしている)の計算における, 鉛直方向切断次数170の結果を 基準とした誤差の鉛直方向切断次数依存性(水平切断波数T85) (Ishioka, et al. (2022) Fig. 6)

縦軸が地表面気圧の誤差のl2ノルム.横軸が鉛直方向切断次数.

ということで, Held and Suarez (1994)のテストケースでは, 鉛直グリッド 数は20だが, 鉛直の自由度は 14 であるので, 差分法より少ない自由度で精 度良く計算できていることが分かる. その他, Polvani, et al. (2004)のテス トケースでもチェックを行っている.

Jablonowski and Williamson (2006)のテストケース設定(ただし, 初期擾 乱を1/1000にしている)では, 鉛直の切断次数を上げていくと, 傾圧不安定 擾乱が発達した段階での地表面気圧の気圧の誤差が, 急速に小さくなって いくことが確認できた.

その他, 固有値解析や, スポンジ層の設定, 鉛直自由度を落したトイモデル の構築など, いろいろ副産物もある. その一例として, Lamb波の計算も行っ ている. 等温静止大気で回転が無い場合を考えると,3次元スペクトルモデルを線形 化したものから得られる一般化固有値問題の式は,以下のようになる.ここ に,cは無次元化された位相速度,Aは三重対角行列,Bは五重対角対称行列.

3次元スペクトル法の定式化に基いて計算したLamb波の鉛直構造(Ishioka, et al. (2022) Fig. 9)

横軸は振幅,縦軸は σ . 点線は理論解 $\sigma^{-\kappa}$. 実線が数値解. また, $\kappa = 2/7$.

計算されたLambモードの($\sqrt{RT_0}$ で無次元化された)位相速度の鉛直切断

次数L依存性. 真値は $\sqrt{7/5} \approx 1.183216$.

L = 10	L = 20	L = 40	L = 80
1.170342	1.176177	1.179378	1.181121

3次元スペクトル法の定式化で計算したLamb波の位相速度の誤差の切断次 数依存性(Ishioka, et al. (2022) Fig. 10)


```
Ishioka, K., 2023:
What is the equivalent depth of the Pekeris mode?
JMSJ, 101, 139–148.
および
Ishizaki, H., T. Sakazaki, and K. Ishioka, 2023:
Estimation of the equivalent depth of the Pekeris mode using reanalysis
data. JMSJ, 101, 461-469.
に関する話題.
```

Ishioka, et al. (2022)が acceptされたのが 2021年12月17日. その約1ヶ月後, 2022年1月15日に Hunga Tonga-Hunga Ha'apai 火山の噴火があった.

The HTHH eruption as viewed from the Himawari-8 weather satellite (Proud, et al. (2022) Fig. 1)

04:20UTC 04:50UTC

Fig. 1. The HTHH eruption as viewed from the Himawari-8 weather satellite. (**A**) At 04:20 UTC on 15 January 2022, ~10 min after the eruption began. (**B**) At 04:50 UTC, after the initial dome collapsed, leaving remnants at 55- to 58-km altitude that cast a shadow (to the right) onto the umbrella

cloud at 34 km. (C) At 05:40 UTC, as the volcanic umbrella spreads south-westward and the Sun begins to set, emphasizing the shadows that we used to calculate plume altitude and highlighting wave structure in the umbrella top.

05:40UTC

その後, この噴火で, Lamb波だけでなく, Pekeris波が検出されたことを示 す論文(Watanabe et al., 2022)が投稿されたことを知る(2022年4月).

The 10-minute difference of the 9.6μ m brightness temperature observed by Himawari-8 (08:40UT-08:30UT) (Watanabe, et al. (2022) Fig. 1)

Fig. 1. The 10-minute difference of the 9.6 μ m brightness temperature observed by Himawari-8 plotted about 4 hours after the eruption (difference of 08:40UT – 08:30UT, 15 January 2022). Our identification of the wave fronts associated with the Lamb and Pekeris modes are marked. The Gaussian filter was applied 10 times and shadings outside the minimum and maximum of the color scale are omitted for clarity.

Watanabe, et al. (2022)において, 擾乱伝播の位相速度の方位角平均から, Lamb波の等価深度は 10.1km, Pekeris波の等価深度は 6.1kmと見積られ, それらの値は, Salby (1979) が, 大気自由振動の鉛直構造方程式を U.S. STANDARD ATMOSPHERE, 1976 (以下, USSA76として引用)の大気温 度構造に対して計算して得られた値の9.6 km と 5.8 km と対比されていた.

これに興味を持ち, Ishioka, et al. (2022)の定式化で, USSA76の大気温度 構造を与えた場合, 等価深度がいくらになるのか計算してみた.

3次元スペクトルモデルでの固有値計算の結果(等価深度(km)) 鉛直格子点数 鉛直切断波数 Lambモード Pekerisモード

1024	1023	9.90	6.32
1024	682	9.90	6.30
512	341	9.90	6.24
256	170	9.89	6.19
128	85	9.88	6.03

ということで, 鉛直の切断次数をかなり大きくしても, Salby (1979)の結果 と合わない.

何かSalby (1979)が考慮していてこちらで見落していることもあるのかと 思い, Salby (1979)がやったことを徹底的に見直してみた. 結果, Salby (1979)の計算に問題があったことが分かり, それを指摘してちゃんとした 精度で等価深度を計算しなおした論文(Ishioka, 2023)を出版した.

以下,背景となる大気の自由振動の話からおさらい.

大気の自由振動(その1)

プリミティブ方程式のもと,静止大気を基本場とした場合,擾乱に関して線 形化したされた大気運動の基礎方程式は,水平方向と鉛直方向に変数分離 され,水平方向は全球ではLaplaceの潮汐方程式の形になり,「等価深度」 hの深さの線形浅水方程式と同じになる.このとき,自由振動の等価深度は, 鉛直構造方程式の固有値として定まり,鉛直温度プロファイルによって値が 決まる.

大気の自由振動(その2)

等温大気のとき,その場合のスケールハイトを H とすると,hは唯一しか 解がなく = γH となる(γ は比熱比) (Lamb, 1911)

現実大気の等価深度がどうなるかは,大気全体の鉛直温度構造が分からないと鉛直構造方程式が解けないため進展がなかったが, Taylor (1929)が 1883年のKrakatoaの噴火の際の気圧擾乱の伝播速度から,等価深度が 10.4km程度であると見積った. (現在では,この等価深度のモードは Lambモードと呼ばれている).

大気の自由振動(その3)

この約10kmというのが大気の自由振動の唯一の等価深度と思われたが, 熱帯域の大気の熱潮汐の振幅が1日周期より半日周期の方が大きいことの 原因として,熱強制と自由振動との共鳴が疑われていた(これは違うという ことが現在では判明しているが).8km程度の等価深度のモードが存在する かどうかがKelvin (1882)以来,大きな関心事であった.そのような時代背 景のもと,Pekeris (1937)が,成層圏界面の高温域の温度によっては,Lamb モードと別個に,8km程度の等価深度のモードも存在しうることを示した. Pekeris (1937)で使われた鉛直温度プロファイルと,計算された等価深度 (Pekeris (1937)の Fig. 2 と Table 1)

大気の自由振動(その4)

より現実的な鉛直温度分布を与えた等価深度の計算は Salby (1979)によっ てUSSA76に対して行われたが, そこでは, Lambモードに相当する等価深 度として 9.6kmが得られただけでなく, 5.8kmの等価深度も得られた. 後者 の方が Pekerisが存在可能性を指摘したモードに対応するものだが(Salby はducted modeと呼んだ), そのようなモードの実在性についてはこれまで 検出されていなかった.

大気の自由振動(その5)

Watanabe et al. (2022)では, Himawari-8の輝度温度データの時間差分を とることにより, 位相速度 315m/s程度の波(等価深度 10.1kmに対応)と, 245m/s程度(等価深度 6.1kmに対応)の波が検出された.

前者は Lambモードに相当するものだが,後者は Pekeris が存在可能性を 指摘したモードに相当するものと考えられるため,これを Pekerisモードと 呼ぶことを提案した.このように Pekerisモードが検出されたのはこの論 文が初めてのことである.この論文では,GCMを用いた数値実験や,ERA5 再解析データでも Pekerisモードが見出されることを示している. Power spectrum for eastward-propagating wavenumber 1 and 2 components for equatorially symmetric components of the surface pressure calculated with ERA5 data for 20°S–20°N during 1950–2016 (Watanabe, et al. (2022) Fig. 9d)

Gray solid (denoted by "P") and dashed lines (denoted by "L") are for resonant frequencies for h=6.1 km and h=10.1 km, respectively.

大気の自由振動(その6)

以上の背景のもと, 私も Ishioka, et al. (2022)で提案した鉛直スペクトル 法の GCMのコードを用いて, USSA76の温度分布に関して, 等価深度の計 算をしてみたが, 既に述べたように, Salby (1979)が計算したような5.8km 程度というほどの等価深度にはならなかった. さらに, Lambモードの等価 深度も 9.6kmよりは明らかに大きな値になっていた.

そこで, Salby (1979)の計算手法を見直してみたところ, 計算手法に問題が あって大幅な精度低下を引き起していることが分かったので, その問題点 と, それを修正した場合どうなるかについて報告する. Salby (1979) はどうやって等価深度を計算したのか?

鉛直構造方程式と下端境界条件は,線形化されたプリミティブ方程式系か ら以下のように導かれる:

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} - \frac{1}{\tilde{H}} \right] \left[\frac{1}{(\tilde{H}' + \kappa)} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} (\tilde{H}Z) \right] + \alpha Z = 0,$$

$$\tilde{H}Z' - \kappa Z = 0 \quad (\zeta = 0).$$

$$(2)$$

 $Z(\zeta)$ は圧力擾乱の鉛直構造を与える関数, $\zeta = z/H$, zは幾何高度 H は 定められたスケールハイト, $\kappa = (\gamma - 1)/\gamma \overline{c}, \gamma$ は比熱比(7/5), $\alpha = H/h$ で, hは等価深度.

$$ilde{H}(\zeta) = rac{R_0 T(\zeta)}{g_0 H}$$
 (局所的なスケールハイトを H で無次元化したもの).

 R_0 : 乾燥大気の気体定数, g_0 : 重力加速度, $T(\zeta)$: 鉛直温度プロファイル.

Salby (1979)は, 鉛直構造方程式(2)と下端境界条件(3)をそのままの形では扱わず,以下のように変換してから使っていた.

$$Z(\zeta) = e^{\xi/2} \tilde{H}^{-1} [\tilde{H}' + \kappa]^{1/2} v(\zeta)$$
(5)

ここで, ξは以下のように定義される.

$$\xi(\zeta) = \int_0^{\zeta} \frac{\mathrm{d}\eta}{\tilde{H}(\eta)}.$$
(6)

(2)と(3)は,以下のように書ける.

$$v'' + k^2(\zeta; \alpha)v = 0, \qquad \tilde{H}\tilde{H}'' \qquad (7)$$

$$\tilde{H}v' + \left[\frac{1}{2} - (\tilde{H}' + \kappa) + \frac{1}{2(\tilde{H}' + \kappa)}\right]v = 0 \quad (\zeta = 0).$$
 (8)

ここに, $k^2(\zeta; \alpha)$ は「屈折率」で,以下のように定義される.

$$k^{2} = -\frac{1}{4\tilde{H}^{2}} + \frac{\tilde{H}'''}{2(\tilde{H}' + \kappa)} - \frac{3(\tilde{H}'')^{2}}{4(\tilde{H}' + \kappa)^{2}} - \frac{\tilde{H}''}{2\tilde{H}(\tilde{H}' + \kappa)} + \frac{\alpha(\tilde{H}' + \kappa)}{\tilde{H}}.$$
 (9)

USSA76の温度プロファイルから計算される \tilde{H} と屈折率 k^2 の分布 (Salby (1979) Fig. 1 and 3)

FIG. 3. Vertical refractive index as a function of α .

ここに, $H = R_0 T_* / g_0$ で, $T_* = 250 \text{ K}$ としているので, $H \approx 7.32 \text{ km}$.

Salby (1979)は(7)を十分な高高度で放射境界条件を定めて, そこからから 下向きに数値的に解いていき, 下端境界条件(8) が(近似的に)満たされる の値を探した.

FIG. 2. Normalized surface error as a function of α .

2つの明瞭な凹みが $\alpha = 0.764$ と $\alpha = 1.25$ に見える. これらは, それぞれ, 等価深度9.6 km と 5.8 kmに対応する. 前者は Lambモードに対応し, 後者は, Pekerisモードに対応する. (Salby (1979)は「ducted mode」と呼んでいるが).

Salby (1979) Fig. 2 ($\alpha = H/h$)

Salby (1979)の手法の問題点

USSA76のように, 鉛直温度勾配に不連続な点があるような分布を用いる 場合, \tilde{H}'' は不連続点で δ 関数的になり, \tilde{H}''' は δ 関数の微分になってしまう. これは, 「屈折率」 k^2 を定める際に問題となる.

Salby (1979)の手法の問題点を克服するには?

以下のような単純な変換だけを考える.

$$Z(\zeta) = e^{\xi/2} \tilde{Z}(\zeta).$$
(10)

この Źを使うと, 鉛直構造方程式(2)と下端境界条件(3)は, 以下のように書ける.

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} - \frac{1}{2\tilde{H}} \right) \left[\frac{1}{\tilde{H}' + \kappa} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} + \frac{1}{2\tilde{H}} \right) (\tilde{H}\tilde{Z}) \right] + \alpha \tilde{Z} = 0,$$

$$\tilde{H}\tilde{Z} - \frac{\tilde{H}}{\tilde{H}' + \kappa} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} + \frac{1}{2\tilde{H}} \right) (\tilde{H}\tilde{Z}) = 0 \quad (\zeta = 0).$$

$$(11)$$

式(11)を十分高高度で放射境界条件を与えて下向きに数値計算していき, 下端境界条件(12)が(近似的に)満されるαを探す.

明確な凹みが $\alpha = 0.739 \ge \alpha = 1.107$ で見られる. これらは, それぞれ, 等価深度 $h = 9.90 \text{ km} \ge h = 6.61 \text{ km}$ に対応する.

すなわち, Salby (1979)の計算結果は, Pekeris モードについて特に不正確.

より凝った計算

以上のように, Salby (1979)の結果は不正確であるというのが結論だが, Salby (1979)がもしかすると論文に書かれていない細かいことを考慮してその結果を出してたのかとも思い, 念のため, 重力加速度, 平均分子量の高度依存 性まで考慮した計算もやってみた.

(Ishioka (2023)の Fig. 1と Fig. 4a, 4b)

このように凝ったことをしても,結局誤差の α 依存性は殆んど変わらず,求 まる等価深度は,Lambモードがh = 9.90 km, Pekerisモードがh = 6.63 kmであった.

結局, 有効数字2桁の範囲では, USSA76の温度分布を用いる場合, Lamb モードの等価深度は, h = 9.9 km, Pekerisモードの等価深度は, h = 6.6km というのが結論.

※Watanabe, et al. (2023)の結果と比較すると, Lambモードの等価深度が約10 kmというのは整合的だが, Pekerisモードの等価深度が6.6 kmというのは, 6.1 kmという見積りに比べて大きい. ただし, Ishioka (2023)では, USSA76の温度分布を使っているので, Watanabe, et al. (2023)でPekeris モードを検出した緯度帯や季節等を考慮すると, 温度構造が違うので, 等価 深度は違っている可能性もある.

ということで, ERA5のデータを使って, HTHH噴火時の熱帯域の大気の鉛 直温度プロファイルを用いて, 等価深度の計算をやってみた (Ishizaki, et al., 2023).

結論として, そのように現実的な温度分布を用いても, Lambモードの等価 深度は, h = 10.1 km, Pekerisモードの等価深度は, h = 6.5 km という 値であり, USSA76を用いた場合と大きくは違わない. さらに, ERA5の67年分の熱帯の地表面気圧データのスペクトル解析から, Pekrisモードに相当するピークには, 等価深度 6.1 kmよりも6.5 kmとした 場合の方がより合致しているように見える(Ishizaki, et al. (2023) Fig. 5).

Fig. 5. Power spectrum for eastward-propagating wavenumber 1 (E1) and wavenumber 2 (E2) components for equatorially symmetric surface pressure (during 1950–2016) averaged for $20^{\circ}S-20^{\circ}N$, as adopted by Fig. 9d of Watanabe et al. (2022) with a slight modification. Thin, red dashed and solid vertical lines indicate the theoretical-ly predicted resonant frequencies for h = 10.1 km and 6.1 km, respectively, while thick, red vertical lines are for those for h = 6.5 km. ©American Meteorological Society. Used with permission.

この部分のまとめと考察

Pekerisモードの等価深度は, USSA76の鉛直温度分布では 6.6 km, HTHH 噴火時の熱帯の温度分布を考えても 6.5 kmとなる. この 6.5 kmというの は, ERA5の67年分の熱帯の地表面気圧データのスペクトル解析とは整合 的だが, Watanabe, et al. (2022)の見積もりの 6.1 kmとはずれている.

このずれの要因として, Watanabe, et al. (2022)で検出された遅い方の波 動はまだ完全に Pekerisモードだけが卓越しているわけではない transient な状態を見ているという可能性や, また, 平均流が影響している可能性も ある. 以上, ISPACKの開発の経緯とそれに関連する最近の私の研究として, Ishioka (2018), Ishioka, et al. (2022), Ishioka (2023), およびIshizaki, et al. (2023)について紹介した.

ISPACKも含めて, 力学コアを自前で作るとか, いろいろ自分たちでやっていると, 温故知新な感じでいろいろ新たな発見があることに改めて気づかされる(「車輪の再発明」と言われかねないが).

自分自身でいろいろコードを書いてきたことについては, GFD電脳倶楽部 の先達の皆さんから学ばせてもらったことが非常に大きいので, その活動 を常にリードされてきた林先生に改めて感謝したい.

- Held, I. M., and M. J. Suarez, 1994: A proposal for the intercomparison of the dynamical cores of atmospheric general circulation models. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **75**, 1825–1830.
- Ishioka, K., 2018: A new recurrence formula for efficient computation of spherical harmonic transform. *J. Meteor. Soc. Japan*, **96**, 241–249.
 Ishioka, K., 2023: What is the equivalent depth of the Pekeris mode? *J. Meteor. Soc. Japan*, **101**, 139–148.
- Ishioka, K., N. Yamamoto, and M. Fujita, 2022: A formulation of a threedimensional spectral model for the primitive equation. *J. Meteor. Soc. Japan*, **100**, 445–469.
- Ishizaki, H., T. Sakazaki, and K. Ishioka, 2023: Estimation of the equivalent depth of the Pekeris mode using reanalysis data. *J. Meteor. Soc. Japan*, **101**, 461-469.

- Jablonowski, C., and D. L. Williamson, 2006: A baroclinic instability test case for atmospheric model dynamical cores. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **132**, 2943–2975.
- Kelvin, Lord (W. Thomson), 1882: 2. On the thermodynamic acceleration of the Earth's rotation. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh*, **11**, 396–405.
- Lamb, H., 1911: On atmospheric oscillations. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A84**, 551–572.
- Machenhauer, B., and R. Daley, 1974: *Hemispheric spectral model*. *GARP Pub. Ser.*, No. 14, 226–251.
- Pekeris, C. L., 1937: Atmospheric oscillations. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A158**, 650–671.
- Polvani, L. M., R. K. Scott, and S. J. Thomas, 2004: Numerically converged solutions of the global primitive equations for testing the dynamical core of atmospheric GCMs. *Mon. Wea. Rev.*, **132**, 2539– 2552.

- Proud, S. R., A. T. Prata, and S. Schmauß, 2022: The January 2022 eruption of Hunga Tonga-Hunga Ha'apai volcano reached the meso-sphere. *Science*, **378**, 554–557.
- Salby, M. L., 1979: On the solution of the homogeneous vertical structure problem for long-period oscillations. *J. Atmos. Sci.*, **36**, 2350– 2359.
- Schaeffer, N., 2013: Efficient spherical harmonic transforms aimed at pseudospectral numerical simulations, *Geochemistry, Geophysics, Geosy tems*, **14**, 751–758.
- Taylor, G. I., 1929: Waves and tides in the atmosphere. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A126**, 169–183.
- Watanabe, S., K. Hamilton, T. Sakazaki, and M. Nakano, 2022: First detection of the Pekeris internal global atmospheric resonance: evidence from the 2022 Tonga eruption and from global reanalysis data. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **79**, 3027–3043.

Yoden, S. and M. Yamada, 1993: A numerical experiment on two-dimensional decaying turbulence on a rotating sphere. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 631–644.

気象庁, 1982: 気象庁予報部電子計算機室報告・別冊第28号「スペクトル 法による数値予報(その原理と実際)」, (執筆者: 金光正郎・佐藤信夫・伊 佐真好・工藤達也)

黒木志洸・村上茂教, 2015: 鉛直方向に Chebyshev 多項式展開を用いた 3次元スペクトルモデルの構築. 日本気象学会 2015 年春季大会予稿集, P434.

林祥介, 1987: 2次元定常ロスビー波の線形論. 気象研究ノート, 156, 235–254.