

Turbulenzschließungsmodellierung für Küstengewässer

Hans Burchard, Ulf Gräwe, Peter Holtermann, Knut Klingbeil und Lars Umlauf

Zusammenfassung

In diesem Artikel wird die Anwendung von Turbulenzschließungsmodellen in numerischen Modellen für den Küstenozean dargestellt. Zwei-Gleichungs-Turbulenzschließungsmodelle stellen für die Berechnung von diapkyknischen Impuls-, Wärme- und Konzentrationsflüssen im Küstenozean einen optimalen Kompromiss zwischen Effizienz und Genauigkeit dar. Diese Modelle gewährleisten ausreichende Freiheitsgrade, um sie für die wichtigsten Eigenschaften der Vermischung im Küstenozean zu kalibrieren, sind aber immer noch numerisch robust und effizient im Bedarf an Rechenzeit. Isopyknische Vermischungsschemata werden ebenfalls kurz dargestellt. Die wichtigsten Aspekte der Implementierung und Numerik werden diskutiert, wobei der Schwerpunkt auf der numerisch induzierten Vermischung liegt, die zusammen mit der physikalisch induzierten Vermischung erst die effektive Vermischung in Ozeanmodellen ergibt.

Vertikal-adaptive Koordinaten werden als eine Möglichkeit dargestellt, die numerische Vermischung zu reduzieren. Abschließend werden Beispiele von Simulationen im Küstenozean mit dem General Estuarine Transport Model (GETM) in Kopplung mit dem Turbulenzmodul des General Ocean Turbulence Model (GOTM) gezeigt. Diese Beispiele umfassen Vermischung in der Thermokline der nördlichen Nordsee, physikalisch und numerisch induzierte Vermischung in der westlichen Ostsee sowie beckenweite Vermischung in der zentralen Ostsee. Diese drei Beispiele zeigen, wie wichtig die Verwendung von gut kalibrierten Turbulenzschließungsmodellen zusammen mit vertikal-adaptiven Koordinaten in der Modellierung von Prozessen im Küstenozean ist.

Schlagwörter

Küstenozeanmodellierung, Turbulenzschließungsmodellierung, numerische Vermischung, adaptive Koordinaten, General Ocean Turbulence Model (GOTM), General Estuarine Transport Model (GETM)

Summary

In this paper the use of turbulence closure models in coastal ocean models is reviewed. Two-equation turbulence closure models are argued to be an optimal compromise between efficiency and accuracy for the purpose of calculating diapycnal fluxes of momentum, heat and tracers in coastal ocean modelling. They provide enough degrees of freedom to be calibrated to the most prominent properties of coastal ocean mixing, but are still numerically robust and computationally efficient. Isopycnal mixing schemes are briefly reviewed as well. Major implementational and numerical aspects are presented, with some focus on the inherent problem of numerically-induced mixing which together with the physically-induced mixing gives the effective mixing in ocean models. Vertically adaptive coordinates are presented as one possibility to reduce

numerical mixing. Finally, three coastal ocean simulation examples from the General Estuarine Transport Model (GETM) which is coupled to the turbulence module of the General Ocean Turbulence Model (GOTM) are given. These examples include thermocline mixing in the Northern North Sea, physically and numerically induced mixing in the Western Baltic Sea as well as basin-wide mixing in the Central Baltic Sea. All three examples highlight the importance of using well-calibrated turbulence closure models together with vertically adaptive coordinates.

Keywords

coastal ocean modelling, turbulence closure modelling, numerical mixing, adaptive coordinates, General Ocean Turbulence Model (GOTM), General Estuarine Transport Model (GETM)

Inhalt

1	Einleitung	76
2	Turbulenzschließungsmodelle	78
2.1	Zwei-Gleichungsmodelle zur Turbulenzschließung als Arbeitshilfen für die Parametrisierung vertikaler turbulenter Flüsse.....	78
2.2	Parametrisierungen für horizontale turbulente Flüsse.....	81
3	Numerische und implementierungsbezogene Aspekte	83
4	Beispiele der Küstenozeanmodellierung	84
4.1	Vermischung in der Thermokline der zentralen Nordsee	85
4.2	Physikalische und numerische Vermischung in der westlichen Ostsee.....	87
4.3	Beckenweite Vermischung in der zentralen Ostsee	88
5	Schlussfolgerungen	91
6	Schriftenverzeichnis.....	92

1 Einleitung

Die turbulente Dissipation und Vermischung sind für die Dynamik des Küstenozeans und den damit verbundenen Transporten von Wärme, Salz, Schwebstoffen sowie von gelösten biogeochemischen Substanzen von enormer Bedeutung. Der stochastische Charakter der Turbulenz und ihre starke räumliche und zeitliche Variabilität erweisen sich jedoch bei direkten Beobachtungen von Vermischung und Dissipation als hinderlich. So sind aussagekräftige Turbulenzbeobachtungen nur an einzelnen Orten und mit verhältnismäßig großem messtechnischen Aufwand möglich. Üblicherweise werden von Bord aus betriebene frei sinkende Profiler zur Messung der Turbulenz-Mikrostruktur eingesetzt und hochauflösende Ultraschall-Doppler-Messungen der Strömungsgeschwindigkeiten von vertäuten Plattformen aus durchgeführt. Erfolgreiche Beobachtungen dieser Art in den Küstenzonen der Nord- und Ostsee wurden beispielsweise von BECHERER et al. (2011), UMLAUF et al. (2007) und VAN DER LEE und UMLAUF (2011) durchgeführt. Für Prozessuntersuchungen in Küstengewässern sind diese Beobachtungen unerlässlich, doch angesichts des räumlichen und zeitlichen Intermettenz der Turbulenz ermöglichen sie in

der Regel keine hinreichend genaue Ermittlung des turbulenten Transports und der Vermischung insgesamt, die in Gesamtgebieten der Küstenozeane, wie z. B. in den Becken in der Ostsee, in Tideästuaren oder in der Deutschen Bucht, auftreten. Für derartige systemweite Untersuchungen werden realistische dreidimensionale numerische Modelle angewendet, die eine Parametrisierung der turbulenten Prozesse mit statistischen Methoden ermöglichen. Die (üblicherweise von Beobachtungen der Strömungen und Schichtung begleiteten) Turbulenzbeobachtungen sind dann von größtem Wert für die Modellkalibrierung und -validierung.

Zu den wichtigsten Prozessen, für die die Turbulenz im Ozean von wesentlicher Bedeutung ist, zählen beispielsweise der jährliche Zyklus der Dynamik der Deckschichten (von dem die gesamte Primärproduktion abhängt), der Sedimenttransport in hochdynamischen Gewässern wie dem Wattenmeer oder Tideästuaren (der z. B. für die morphodynamische Evolution dieser Gewässer entscheidend ist), die Kreisläufe und residuellen Strömungen in Ästuaren und Mündungsbereichen (von denen der Transport residueller Sedimente und gelöster Stoffe abhängt), das Entrainment des umgebenden Wassers in Oberflächenschichten geringer Dichte (wie beispielsweise Flussfahnen) oder dichte Bodenströmungen wie die Salzwasserzuflüsse in die Ostsee, um nur einige zu nennen.

Die dreidimensionalen Flachwassergleichungen (d. h. die hydrostatischen Gleichungen) für die Impulserhaltung zur Berechnung des Geschwindigkeitsvektors (u, v, w) sind Grundlage der meisten Küstenozeanmodelle. Beispiele sind hier Modelle mit strukturierten Gittern wie ROMS (Regional Ocean Modelling System, www.myroms.org, siehe z. B. SHCHEPETKIN und MCWILLIAMS 2005) und GETM (General Estuarine Transport Model, www.getm.eu, siehe z. B. HOFMEISTER et al. 2010 sowie die darin enthaltenen Referenzen) sowie Modelle mit unstrukturierten Gittern wie SELFIE (http://www.stccmop.org/knowledge_transfer/software/selfie, ZHANG und BAPTISTA 2008) und FVCOM (Unstructured Grid Finite Volume Coastal Ocean Model, <http://fvcom.smast.umassd.edu/FVCOM/>, CHEN et al. 2002). Den genannten Modellen liegt folgende allgemeine Form der Impulserhaltungsgleichungen zugrunde (siehe z. B. BLUMBERG und MELLOR 1987):

$$\begin{aligned} \partial_t u + \partial_x(uu) + \partial_y(uv) + \partial_z(uw) - \partial_x(2A_h \partial_x u) - \partial_y(A_h(\partial_y u + \partial_x v)) - \partial_z(A_v \partial_z u) = \\ +fv - g\partial_x \eta + \int_z^\eta \partial_x b d\xi \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \partial_t v + \partial_x(vu) + \partial_y(vv) + \partial_z(vw) - \partial_y(2A_h \partial_y v) - \partial_x(A_h(\partial_y u + \partial_x v)) - \partial_z(A_v \partial_z v) = \\ -fu - g\partial_y \eta + \int_z^\eta \partial_y b d\xi \end{aligned} \quad (2)$$

wobei gilt: x und y bezeichnen die horizontalen Koordinaten, z die vertikale Koordinate (aufwärts positiv) und t die Zeit. f ist der Coriolisparameter, $b = -g(\rho - \rho_0)/\rho_0$ die Auftriebskraft (mit Fallbeschleunigung g , Referenzdichte ρ_0 und potentieller Dichte ρ), und η ist der Wasserstand. In Verbindung mit den Gleichungen für Temperatur und Salzgehalt sowie einer Zustandsgleichung für die Berechnung der potentiellen Dichte ist dieses Gleichungssystem geschlossen, mit Ausnahme der Bestimmung der vertikalen und horizontalen Wirbelviskosität A_v beziehungsweise A_h , und der vertikalen und horizontalen Wirbeldiffusivität K_v beziehungsweise K_h (letztere Werte werden für die

Haushaltsgleichungen für Temperatur, Salzgehalt und andere Tracer benötigt). Um die vertikale Wirbelviskosität und -diffusivität A_v und K_v zu bestimmen, ist eine Turbulenzschließungsmodellierung erforderlich. Für diese stehen unterschiedliche komplexe Theorien zur Verfügung. Alle oben erwähnten Küstenozeanmodelle sind direkt an die Bibliothek der Turbulenzschließungsmodelle GOTM (General Ocean Turbulence Model, www.gotm.net, UMLAUF und BURCHARD 2005) angekoppelt (oder verwenden abgespeicherte Versionen wie im Falle von ROMS, siehe WARNER et al. 2005.) Die grundlegende Theorie wird in Kap. 2.1 vorgestellt. Für die Modellierung der horizontalen Wirbelviskosität und -diffusivität A_h und K_h werden üblicherweise die in Kap. 2.2 kurz diskutierten verhältnismäßig einfachen algebraischen Schließungen verwendet.

2 Turbulenzschließungsmodelle

2.1 Zwei-Gleichungsmodelle zur Turbulenzschließung als Arbeitshilfen für die Parametrisierung vertikaler turbulenter Flüsse

Zwei-Gleichungsmodelle zur Turbulenzschließung haben sich in den letzten Jahrzehnten als wichtige Modellkomponenten in der Küstenozeanmodellierung etabliert. Die wichtigsten Vertreter dieser Modellklasse sind das k - ε -Modell (RODI 1980; BURCHARD und BAUMERT 1995), das k - ω -Modell (WILCOX 1988; UMLAUF et al. 2003) und das k - kl -Modell (MELLOR und YAMADA 1982) mit der turbulenten kinetischen Energie bezogen auf die Masseneinheit (TKE) k , der Dissipationsrate der TKE ε , der turbulenten Frequenz $\omega = \varepsilon/k$ und der Längenskala der energietragenden turbulenten Wirbel l . Eine Schlüsselkomponente derartiger Modelle ist die sogenannte Energiekaskade,

$$\varepsilon = c_e \frac{k^{3/2}}{l} \quad (3)$$

zwischen den energietragenden turbulenten Bewegungen der Skala l und der Dissipation der kinetischen Energie durch Wirbelelemente der kleinsten (Kolmogorov-)Skalen (c_e ist eine Proportionalitätskonstante). Analog zur kinetischen Theorie der idealen Gase werden die vertikale Wirbelviskosität und -diffusivität als proportional zum Produkt einer turbulenten Längenskala (hier l) und einer turbulenten Geschwindigkeitsskala (hier $k^{1/2}$) bestimmt. Bei Anwendung des in (3) aufgeführten Kaskadengesetzes können diese Beziehungen in ihren am häufigsten verwendeten Formen ausgedrückt werden:

$$A_v = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}; \quad K_v = c'_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4)$$

wobei c_μ und c'_μ dimensionslose Stabilitätsfunktionen sind, die in der Regel Funktionen verschiedener dimensionsloser Strömungsinvarianten sind (s.u.). In etlichen Arbeiten (BURCHARD et al. 1998; BAUMERT und PETERS 2000; UMLAUF et al. 2003; UMLAUF und BURCHARD 2003) konnte gezeigt werden, dass alle zuvor genannten Zwei-Gleichungsmodelle in Situationen, in denen der (advective und turbulente) Transport von Turbulenzgrößen vernachlässigbar ist, mathematisch äquivalent sind. Da diese Situationen die grundlegenden Eigenschaften der in Küstenozeanmodellen verwendeten Turbulenzmodelle bestimmen, beschränkt sich die nachfolgende Diskussion auf das am häufigsten zum Einsatz kommende Zwei-Gleichungsmodell für die Turbulenzschließung: das

k - ε -Modell. In dreidimensionalen Ozeanmodellen wird das k - ε -Modell in der Regel in der folgenden Form angewendet:

$$\partial_t k + \partial_x (uk) + \partial_y (vk) + \partial_z (wk) - \partial_z \left(\frac{A_v}{\sigma_k} \partial_z k \right) = P + B - \varepsilon \quad (5)$$

$$\partial_t \varepsilon + \partial_x (u\varepsilon) + \partial_y (v\varepsilon) + \partial_z (w\varepsilon) - \partial_z \left(\frac{A_v}{\sigma_\varepsilon} \partial_z \varepsilon \right) = \frac{\varepsilon}{k} (c_1 P + c_3 B - c_2 \varepsilon) \quad (6)$$

wobei die 5 empirischen Parameter σ_k und σ_ε (turbulente Schmidt-Zahlen) sowie c_1 , c_2 und c_3 gelten. Bei letzterem Parameter unterscheiden wir zwischen c_3^- für stabile Schichtung und c_3^+ für instabile Schichtung. $P = A_v M^2$ mit dem Quadrat der vertikalen Scherung $M^2 = (\partial_z u)^2 + (\partial_z v)^2$ ist die Scherungsproduktion (Umwandlung der mittleren kinetischen Energie in TKE) und $B = -K_v N^2$ mit dem Quadrat der Auftriebsfrequenz $N^2 = \partial_z b$ ist die Auftriebsproduktion (Umwandlung potentieller Energie in TKE oder umgekehrt). Es ist zu beachten, dass die TKE-Gleichung direkt aus einer Reynoldsmittelung der Navier-Stokes-Gleichungen abgeleitet werden kann, mit einer einzigen, relativ einfachen Schließungsannahme: dem Gradientenausdruck für die turbulenten Flüsse. Die rechte Seite der Erhaltungsgleichung für die Dissipationsrate ist jedoch rein empirisch, bei Annahme dimensionaler Konsistenz und einer Form der Quell- und Senkterme, die analog zu den Termen in der TKE-Gleichung ist.

Die fünf freien Parameter des k - ε -Modells bieten hinreichend Freiheitsgrade für die Kalibrierung des Modells auf die wichtigsten Standardströmungen. Dabei basiert die Kalibrierung der drei Parameter auf der rechten Seite der Dissipationsgleichung auf der Annahme einer homogenen turbulenten Strömung, für die alle räumlichen Gradienten auf der linken Seite von (5) und (6) verschwinden, sodass ein System von zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen (DGLn) verbleibt. Zur Kalibrierung von c_1 wird (3) verwendet, um eine DGL für die Längenskala l aus (5) und (6) in folgender Form abzuleiten:

$$\partial_t l = c_e \frac{k^{1/2}}{\varepsilon} ((1,5 - c_1)P + (1,5 - c_3)B - (1,5 - c_2)\varepsilon) \quad (7)$$

Ausgehend von dem theoretischen Argument, dass die Scherung, welche die Dimensionen einer inversen Zeit hat, keine Längenskala bestimmen kann (BAUMERT und PETERS 2000), wird $c_1 = 1,5$ zur Eliminierung des Scherungsproduktionsterms auf der rechten Seite von (7) benötigt. Zur Kalibrierung von c_2 wird frei zerfallende Turbulenz mit $P = B = 0$ angenommen. Für diese lassen sich die DGLn für k und ε für großes t als

$$\frac{k}{k_0} \propto \left(\frac{t}{t_0} \right)^d \quad (8)$$

mit der Zerfallsrate $d = -1/(c_2 - 1)$ lösen. In experimentellen Untersuchungen wurde $-1.3 \leq d \leq -1$ bestimmt, woraus sich der realistischer Wertebereich für c_2 ableiten läßt (eine ausführliche Erörterung ist UMLAUF und BURCHARD 2003 zu entnehmen).

Eine Strategie für die Kalibrierung von c_3^- erfordert die Berücksichtigung stationärer Lösungen für die DGLn für k und ε zur Eliminierung von P . Wird die Vermischungseffizienz als $\Gamma = -B/\varepsilon$ definiert, erhalten wir die folgende Beziehung für die Berechnung von c_3^- :

$$\Gamma = \frac{c_2 - c_1}{c_1 - c_3^-} \quad (9)$$

Da eine Vermischungseffizienz von $\Gamma \approx 0.2$ ein fest etabliertes Ergebnis für eine stationäre, stabil geschichtete Scherströmung darstellt (OSBORN 1980), kann c_3^- als der Kalibrierungsparameter für die Vermischungseffizienz betrachtet werden (BURCHARD und HETLAND 2010). Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass eine korrekte Kalibrierung des Modellparameters c_3^- wichtige Voraussetzung für die Modellleistung in stabil geschichteten Strömungen (z. B. in Entrainment-Situationen) ist. Zu beachten ist auch, dass in früheren Ansätzen die Verwendung der stationären Richardson-Zahl (für die ein Wert in der Größenordnung $1/4$ gezeigt wurde) für die Kalibrierung von c_3^- vorgeschlagen wurde (BURCHARD und BAUMERT 1995). Für die instabile Schichtung (konvektive Turbulenz mit $B > 0$) führten HOLT und UMLAUF (2008) an, dass der zweite Term auf der rechten Seite der Gleichung für die Längenskala (7) nicht positiv sein darf, da in diesem Fall nur Quellterme für die Gleichung vorhanden wären. Dies würde dazu führen, dass die Quellterme nur durch den Term für den turbulenten Transport ausgeglichen werden könnten – dieser wäre jedoch in Teilen der Wassersäule gleich null oder hätte das falsche Vorzeichen. Aus diesem Grund empfehlen HOLT und UMLAUF (2008) $c_3^+ = 1.5$.

Die Kalibrierung der Schmidt-Zahl für die Dissipationsrate σ_ε beruht auf der Anforderung, dass die Dissipationsgleichung konsistent mit einer Skalierung nach dem logarithmischen Wandgesetz für stationäre Lösungen mit $B=0$ ist, woraus sich folgender Ausdruck ergibt:

$$\sigma_\varepsilon = \frac{\kappa^2}{(c_\mu^0)^{1/2} (c_2 - c_1)} \quad (10)$$

mit der von Karman-Konstante $\kappa=0.4$ und dem Gleichgewichtswert $c_\mu^0=0.09$ für die Stabilitätsfunktion der Wirbelviskosität. Zu beachten ist, dass die Bodenrandbedingungen für die TKE und ihre Dissipationsrate in der Regel direkt aus dem Wandgesetz abgeleitet werden (siehe BURCHARD und PETERSEN 1999, die zeigen konnten, dass Fluss-Randbedingungen numerisch akkurater sind als die Dirichlet-Bedingungen). Die Konstruktion der Oberflächenrandbedingungen erfolgt auf dieselbe Weise, wobei die Oberflächenreibungsgeschwindigkeit als Geschwindigkeitsskala verwendet wird. Wo die Injektion von TKE aufgrund brechender Oberflächenwellen relevant ist, wird ein Fluss turbulenter kinetischer Energie vorgegeben sowie ein modifizierter Fluss der Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie (UMLAUF und BURCHARD 2003, 2005). Schließlich ist es möglich, die Schmidt-Zahl für die TKE-Gleichung σ_k zu verwenden, um die experimentell bestimmte räumliche Zerfallsrate der TKE für Versuche mit bewegtem Gitter zu kalibrieren (UMLAUF und BURCHARD 2003). Sie sollte einen Wert von etwa eins haben. Ausgehend von diesen Beziehungen würde sich z. B. folgende konsistente Parametergruppe ergeben:

$$c_1 = 1.5; \quad c_2 = 1.9; \quad c_3^- = -0.5; \quad c_3^+ = 1.5; \quad \sigma_k = 1.0; \quad \sigma_\varepsilon = 1.33. \quad (11)$$

Das oben beschriebene Standardmodell $k-\varepsilon$ wird durch eine Wahl für die turbulente Prandtl-Zahl $P_r^t = A_v / K_v$ geschlossen, die im Bereich von eins liegt und von der Schichtung abhängig sein kann (BURCHARD und BAUMERT 1995). Zwei-Gleichungsmodelle

höherer Komplexität werden von sogenannten algebraischen Schließungen der Transportgleichungen für die zweiten Momente (z. B. Reynolds-Spannungen und turbulente Wärme-flüsse) abgeleitet. Für diese Modelle wurden signifikante Verbesserungen gegenüber dem Standardmodell nachgewiesen, insbesondere für dichtegeschichtete Strömungen; eine ausführliche Diskussion findet sich beispielsweise bei BURCHARD (2002) sowie UMLAUF und BURCHARD (2005). CANUTO et al. (2001) stellten erfolgreiche algebraische Reynoldsspannungsmodelle bereit, die von BURCHARD und BOLDING (2001) an die Zwei-Gleichungsmodelle adaptiert wurden. Kurz gesagt ist das Ergebnis dieser Schließungsmodelle zweiter Ordnung, dass die in (4) definierten Stabilitätsfunktionen Funktionen der Scherungszahl $M^2\tau^2$ und der Auftriebszahl $N^2\tau^2$ sind, mit der turbulenten Zeitskala $\tau = k / \varepsilon$.

Aufgrund ihrer Konstruktion sind die Zwei-Gleichungsmodelle Grenzschichtmodelle, für die Beschreibung der Vermischung im Inneren des Ozean, die durch die Interaktion von internen Wellen und Turbulenz bestimmt wird, nicht geeignet. Aus diesem Grund wird im Inneren, aus den Transportgleichungen für k und ε vorhergesagten Turbulenzgrößen gegen Null tendieren, ein niedrigerer Schwellwert für k und ε eingeführt. In diesem Fall wird in geschichteten Strömungen die turbulente Längenskala l durch die Ozmidov-Skala $l_o = (\varepsilon / N^3)^{1/2}$ begrenzt, was auch in der Form $\varepsilon > (c_e / c_{lim})kN$ mit $c_{lim} = 0.53$ neu formuliert werden kann (GALPERIN et al. 1988). In stabil geschichteter Turbulenz wird dabei für die TKE infolge des Energieflusses vom internen Wellenfeld zur Turbulenz die Aufrechterhaltung eines bestimmten Turbulenzniveaus angenommen. Ozeanmodelle liefern in der Regel keine Informationen über diesen Energietransfer. Die turbulente kinetische Energie wird daher einfach durch einen TKE-Mindestwert $k \geq k_{min}$ begrenzt, wobei k_{min} als Kalibrierungsparameter für die Wirbelviskosität im stabil geschichteten niedrigen Energiefluss dient. BURCHARD et al. (2002) konnten zeigen, dass die beobachteten Wirbelviskositäten in der Thermokline der nördlichen Nordsee bei Verwendung des Wertes von $k_{min} = 10^{-6}$ J/kg reproduzierbar waren.

2.2 Parametrisierungen für horizontale turbulente Flüsse

Während es für die Ozeanmodelle einen konsistenten theoretischen Rahmen für die vertikalen turbulenten Flüsse gibt, fehlt es an einem strengen Schließungsmodell für die horizontalen Turbulenzflüsse. Zwei Ansätze werden hier in der Küstenozeanmodellierung üblicherweise verwendet: entweder wird die horizontale Diffusion nicht berücksichtigt (z. B. infolge einer zu starken künstlichen numerischen Vermischung, siehe BURCHARD und RENNAU 2008 und Kap. 3) oder für A_h wird ein konstanter Wert festgesetzt. Die richtige Wahl von A_h wird mittels Sensitivitätsstudien bestimmt. Als wichtigster Kritikpunkt gegen die Verwendung einer konstanten horizontalen Viskosität (Diffusivität) lässt sich sagen, dass dieser Ansatz nicht skalen-sensitiv ist. Eine Erhöhung der Gitterauflösung würde zu einer Verringerung der horizontalen Viskosität führen. Im Grenzfall einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) sollte der Wert von A_h gegen null konvergieren (die bisher vernachlässigte molekulare Viskosität muss in diesem Fall neu eingeführt werden). Der zweite Nachteil der Verwendung einer konstanten A_h ist die Vernachlässigung der räumlichen Struktur der Strömung. In Regionen mit hoher horizontaler Scherung oder Dehnung beispielsweise sollten die horizontalen turbulenten Flüsse stärker sein als

in Regionen mit ruhigem Wasser. Aus diesem Grund wird eine gegenüber der Skala und der Strömung sensitive Sub-Grid-Schließung benötigt.

Eine mögliche Lösung bieten Grobstruktursimulationen (Large Eddy Simulations, LES), in denen die energietragenden Wirbelstrukturen aufgelöst werden. Allerdings ist der für diese Technik erforderliche Rechenaufwand bei der Mehrzahl der ozeanographischen Anwendungen unverhältnismäßig hoch.

Zur Schließung der Lücke entwickelte SMAGORINSKY (1963) eine LES-Schließung für geophysikalische Anwendungen. Sein Ansatz beinhaltet eine Skalierung für die horizontale Wirbelviskosität für ein numerisches Modell, dessen Gitterskala im Bereich der Wirbelkaskade für dreidimensionale Turbulenz liegt, wie von KOLMOGOROV (1941) vorgeschlagen:

$$A_b = c(\Delta x \Delta y) \sqrt{(\partial_x u)^2 + \frac{1}{2}(\partial_y u + \partial_x v)^2 + (\partial_y v)^2} \quad (12)$$

Wobei c eine Konstante im Wert von $O(0,1)$ ist und Δx , Δy die horizontale Gittergröße repräsentieren. Den Anforderungen entsprechend ist diese Parametrisierung sensitiv gegenüber der Skala, berücksichtigt jedoch auch die Scherung und Dehnung des Strömungsfeldes. Der einzige freie Parameter c muss in Sensitivitätsversuchen bestimmt werden. So konnten HOLT und JAMES (2006) beispielsweise zeigen, dass ein Wert von $c = 0.1$ bei ihrer Anwendung ein zu stark ausgebildetes Wirbelfeld erzeugte (im Vergleich mit Satellitenbeobachtungen). Ein Wert von $c = 0.4$ führte zu einem zu glatten Geschwindigkeitsfeld. Sie folgerten daraus, dass ein Wert von $c = 0.2$ zu den besten Ergebnissen führt.

Die Viskosität in Smagorinskys Modell stellte einen beträchtlichen Fortschritt beim Verständnis der Wechselwirkungen zwischen numerischer Auflösung und physikalischen Gegebenheiten dar, und der Ansatz hat sich bei technischen Strömungen und Strömungen im Küstenbereich bewährt. Dessen ungeachtet wurde die Gültigkeit der dem Smagorinsky-Modell zugrundeliegenden Annahmen in den letzten zehn Jahren in Frage gestellt (z. B. FOX-KEMPER et al. 2008).

Die Skalierung in (12) basierte auf der Annahme, dass der Bereich der spektralen Energie $E(k) \propto k^{-5/3}$ mit der Wellenzahl k ist. Kolmogorov entwickelte darüber hinaus die Vorstellung einer Energiekaskade von den großskaligen Wirbelelementen hin zu Wirbelelementen kleinerer Längenmaße. Dasselbe Prinzip gilt für die Enstrophie. Zur Auflösung der Kolmogorov'schen Energiekaskade im Ozean wird eine Auflösung von $O(1 \text{ cm})$ benötigt, die zum jetzigen Zeitpunkt bei weitem noch nicht realisierbar ist. Zusätzlich zeigte CHARNEY (1971), dass im geophysikalischen Bereich die Turbulenz zweidimensional (geostrophische Turbulenz) und nicht mehr isotropisch ist. Er konnte nachweisen, dass die Energie nun als $E(k) \propto k^{-3}$ zu messen ist. Aufgrund der Tatsache, dass in den meisten ozeanographischen Anwendungen die Rossby-Zahl (Verhältnis der horizontalen Beschleunigung zur Coriolis-Beschleunigung) weniger als eins beträgt, befinden sich große Teile der Strömung im geostrophischen Gleichgewicht und werden somit durch die geostrophische Turbulenz beschrieben. CHARNEY erbrachte auch den Nachweis, dass für die Enstrophie immer noch eine Energiekaskade zu beobachten ist. Anders als Kolmogorovs dreidimensionale Turbulenz zeigt die zweidimensionale Turbulenz jedoch eine inverse Energiekaskade, das heißt, die Energie wird von den kleinskaligen Wirbelelementen hin zu Wirbelelementen größerer Längenmaße übertragen. Unter

Berücksichtigung dieser Tatsache wurde von LEITH (1996) eine alternative Skalierung der Viskosität ausgehend von der Vortizität angeregt.

Die Parametrisierungen der horizontalen Viskosität nach SMAGORINSKY (1963) und LEITH (1996) wurden in einem numerischen Versuch von MENEMENLIS et al. (2006) verglichen. Im Ergebnis zeigte der Vergleich, dass die Skalierung der Viskosität auf einer nach LEITH (1996) reproduzierten Enstrophiekaskade basieren sollte und nicht auf einer Skalierung nach SMAGORINSKY (1963), die aus einer Energiekaskade im Intertialbereich resultiert. Allerdings ist bei Verwendung der Skalierung von LEITH (1996) eine Anpassung erforderlich, damit divergente Bewegungen in den 3D-Simulationen nicht instabil oder zu groß werden und dadurch die Courant-Bedingung bei der vertikalen Advektion verletzt wird.

Für die oben erörterten horizontalen Viskositäten wird eine geringere Sensitivität gegenüber Sub-Grid-skaligen Parametrisierungen erwartet als bei grob aufgelösten Modellierungsaufgaben. Ihre Performance ist zudem höher als die der immer noch verwendeten konstanten Viskositäten. Doch auch hochauflösende Ozeanmodelle sind sensitiv gegenüber Sub-Grid-skaligen Parametrisierungen; die Verbesserung der Parametrisierung ist folglich von großer Bedeutung. Im Ozean liegt naturgemäß ein sehr breites und vielfältiges Spektrum an Skalen vor. Phänomene, die wesentlich unter dem Erfassungsniveau des Gitters liegen, beispielsweise sub-mesoskalige Wirbel, der Verlust des geostrophischen Gleichgewichts oder sogar Turbulenzen in der Mikrostruktur – werden auch mindestens in den nächsten Jahrzehnten rein theoretische Parametrisierungen in Ozeanmodellen erforderlich machen (siehe z. B. FOX-KEMPER et al. 2008).

3 Numerische und implementierungsbezogene Aspekte

Für eine modulare Kopplung zwischen einem Turbulenzschließungsmodell und einem dreidimensionalen hydrodynamischen Ozeanmodell ist der Austausch klar definierter Parameterlisten zwischen den beiden Modellen erforderlich. Das 3D-Modell benötigt von dem Turbulenzschließungsmodell die Wirbelviskosität und die Wirbeldiffusivität. Da Turbulenzschließungsmodelle im Regelfall als eindimensionale Wassersäulenmodelle formuliert werden, müssen im 3D-Modell zudem die turbulenten Eigenschaften k und ε gespeichert werden. Das 1D-Turbulenzschließungsmodell benötigt die Scherung M und die Schichtung N zur Berechnung der Produktionsterme sowie die Reibungsgeschwindigkeit (und Rauigkeitslängen) an der Oberfläche und am Boden zur Berechnung der Oberflächen- und Bodenrandbedingungen. Ein Austausch dieser Eigenschaften muss bei jedem Zeitschritt erfolgen. Da 3D-Modelle zumeist auf horizontal und vertikal gestaffelten Gittern basieren, sind räumliche Interpolationen erforderlich, um die ausgetauschten Terme an der richtigen und numerisch stabilen Position zu lokalisieren. Dies ist auch bei Finite Elemente-Modellen von wesentlicher Bedeutung (siehe z. B. KÄRNÄ et al. 2012). Die turbulente Zeitskala ist meistens deutlich kürzer als die Zeitskalen in der Hydrodynamik. Es scheint sich daher anzubieten, die dreidimensionale Advektion von k und ε zu vernachlässigen, die im dreidimensionalen hydrodynamischen Modell beherrscht werden muss. Die Qualitätsanforderungen an die verwendeten Advektionsschemata sind hoch, da die Turbulenzgrößen bei kurzen Entfernungen über mehrere Größenordnungen variieren können und die resultierenden Werte immer noch positiv sein müssen. Aus diesem Grund ist die Anwendung relativ teurer positiv-definitiver Advektionsschemata

zwingend. Auch wenn die Ergebnisse von 3D-Modellen ohne Berücksichtigung der Advektion von Turbulenzgrößen häufig eine hinreichende Genauigkeit bieten, können aufgrund dieser Vernachlässigung numerische Instabilitäten auftreten. In komplexen realistischen Strömungssituationen sollte daher die Turbulenzadvektion berücksichtigt werden.

Ein weiterer wesentlicher Aspekt von Turbulenzschließungsmodellen ist die Diskretisierung der Dissipationsterme für k und ε , um sicherzustellen, dass diese im positiven Bereich liegen (dies ist mathematisch garantiert). Hier findet in der Regel das Verfahren der Quelltermlinearisierung (PATANKAR 1980) Anwendung; eine ausführliche Erörterung bieten BURCHARD et al. (2005).

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass die effektive Dissipation und Vermischung in der Ozeanmodellierung im Allgemeinen größer ist als die auf Basis der Turbulenzschließung physikalisch berechnete Vermischung. Dissipation und Vermischung sind definiert als der Abbau der Varianz der Geschwindigkeit beziehungsweise der Tracer. Für die Temperaturvermischung ergibt sich beispielsweise folgende lokale Berechnung

$$\chi_\theta = 2K_r(\partial_z\theta)^2 + 2K_b(\partial_x\theta)^2 + 2K_b(\partial_y\theta)^2 \quad (13)$$

mit der potentiellen Temperatur θ . Es ist jedoch bekannt, dass die numerische Advektion von Tracern (z. B. Temperatur, Salzgehalt, Schwebstoffe) im Allgemeinen zu einer künstlichen numerischen Vermischung führt, die möglicherweise in derselben Größenordnung wie die physikalische Vermischung vorliegt. Für die exakte Quantifizierung der numerischen Vermischung wurden Verfahren von BURCHARD und RENNAU (2008) sowie KLINGBEIL et al. (2014) entwickelt. Die letztgenannten haben eine Erweiterung der Analyse der numerischen Vermischung in eine Analyse der numerischen Dissipation aufgezeigt. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass für eine Bestimmung der effektiven Vermischung und Dissipation in numerischen Modellen der numerische Varianzabbau ebenfalls zu quantifizieren ist. Eine Verringerung der numerischen Dissipation und Vermischung ist durch Wahl korrekter Advektionsschemata, einer hohen Auflösung oder adaptiver Koordinaten möglich (HOFMEISTER et al. 2010).

4 Beispiele der Küstenozeanmodellierung

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse von Beispielsimulationen in der Küstenozeanmodellierung vorgestellt. Sie zeigen die zentrale Rolle der Turbulenzschließungsmodellierung für diese Regionen. Für alle Simulationen wurde das General Estuarine Transport Model (GETM, siehe z. B. HOFMEISTER et al. 2011) verwendet, welches an das Turbulenzschließungsmodul des General Ocean Turbulence Model (GOTM, siehe UMLAUF und BURCHARD 2005) gekoppelt ist. Die darin enthaltenen Turbulenzschließungen sind in Kap. 2.1 ausführlich beschrieben worden. Um hohe vertikale Auflösungen in (zeitlich und räumlich variablen) Regionen mit starken Scherungs- oder Schichtungserscheinungen zu ermöglichen, wurden für alle Simulationen an den Boden und die Oberfläche angepasste Vertikalkoordinaten (HOFMEISTER et al. 2011) verwendet. In der Horizontalen wurden Kugelkoordinaten mit einem gestaffelten C-Gitter verwendet.

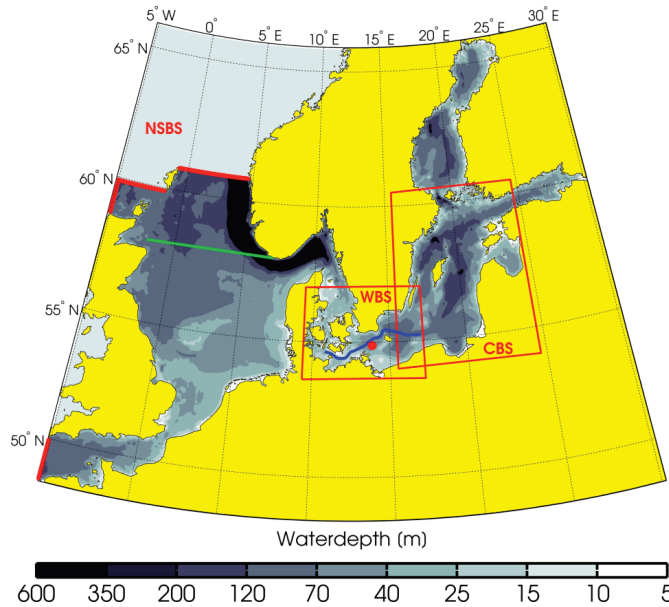


Abbildung 1: Karte der Nordsee / Ostsee 1 Seemeilen-Modellkonfiguration (NSBS). Die beiden roten Rahmen stellen die Grenzen der eingebetteten Modelle (WBS und CBS) dar. Die grüne Linie markiert zusätzlich den Ort, wo sich das Temperaturtransekt von Abb. 2 befindet. Die blaue Linie zeigt das Transekt, wie es in Abb. 4 dargestellt ist. Der rote Punkt zeigt die Position der MARNET Arkona-Boje, deren Daten hier für die Modellvalidierung genutzt werden (siehe Abb. 3).

Der Oberflächenantrieb wurde vom lokalen Modell des Deutschen Wetterdienstes bereitgestellt, während die lateralen Randbedingungen von einer 1 Seemeilen-GETM-Simulation für die gesamte Nordsee- und Ostseeregion vorgegeben wurden. Das vollständige Modellgebiet für diese Simulation ist in Abb. 1 dargestellt. Die entlang eines Transekts in der Nordsee (grüne Linie) erhaltenen Ergebnisse werden in Kap. 4.1 diskutiert. Dieses Transekt für die Nordsee verdeutlicht die Relevanz einer korrekten Auflösung zur Darstellung der Thermokline und der diapkyknischen Vermischungsraten für eine realistische Modellierung der Nordsee. Die Ergebnisse aus einer eingebetteten Simulation für die westliche Ostsee (Western Baltic Sea, WBS) mit einer Auflösung von etwa 600 m und einem Fokus auf die numerische Vermischung sind Kap. 2.2 zu entnehmen. Kap. 4.3 schließlich beschreibt die Ergebnisse aus einer eingebetteten Simulation der zentralen Ostsee (Central Baltic Sea, CBS) mit einer Auflösung von 600 m, in der die tatsächliche beckenweite Vermischung untersucht wurde. Die Modellgebiete für die WBS- und CBS-Modelle sind ebenfalls in Abb. 1 dargestellt.

4.1 Vermischung in der Thermokline der zentralen Nordsee

Die zentrale Nordsee zeichnet sich durch eine Temperaturschichtung im Sommer und eine gute Durchmischung im Winter aus. Die Sommerschichtung beginnt im Frühjahr, wenn die turbulente Vermischung infolge von Tiden und Wind ausreichend unterdrückt wird, weil die nach unten gerichteten Oberflächenwärmeflüsse zu einer Ausbildung von

Temperaturschichten führen. Die Vermischung spielt auch bei der Primärproduktion in der Nordsee eine zentrale Rolle.

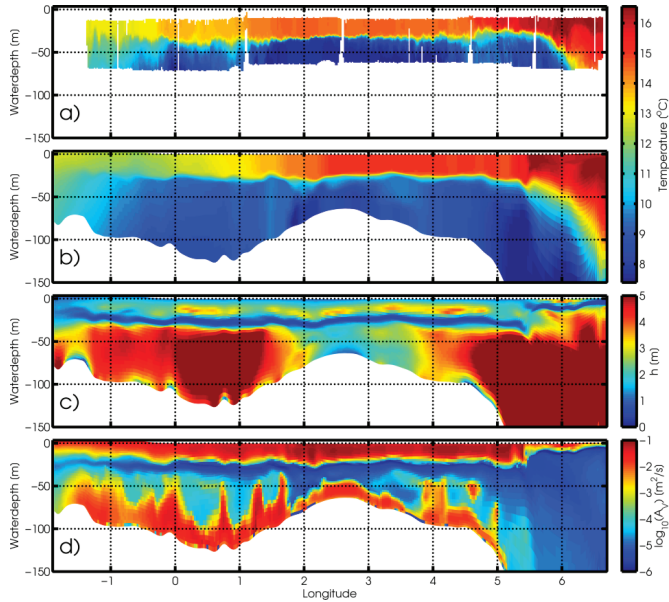


Abbildung 2: Simulationen und Modellergebnisse entlang eines 58°N-Transekts über die Nordsee (siehe grüne Linie in Abb. 1) am 3. September 2009. a: durch eine zwischen Oberfläche und Boden oszillierende CTD-Sonde (vom Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie freundlicherweise zur Verfügung gestellt); b: simulierte Temperatur; c: lokale Dicke der angepassten Koordinaten; d: Wirbelviskosität.

Sobald am Ende des Frühjahrs die Oberflächennährstoffe aufgebraucht sind, beschränkt sich die Nährstoffversorgung der euphotischen Zone auf diapynische aufwärtsgerichtete Nährstoffflüsse von den nährstoffreichen Bodenwasserbereichen der Thermokline. Die Intensität dieser Nährstoffflüsse ist überwiegend abhängig von den Werten, die in der stark geschichteten Region der Thermokline für die Wirbeldiffusivität K_v verzeichnet werden. Wie bereits in Kap. 2.1 erörtert, werden die Wirbelviskosität und die Wirbeldiffusivität in dieser Region durch die Größe für den Mindestwert an turbulenter kinetischer Energie ϵ_{min} gesteuert. Abb. 2 zeigt eine beobachtete und simulierte Temperaturschichtung im Sommer entlang eines 58°N-Transekts der Nordsee. Die Übereinstimmung zwischen den Beobachtungen (die auf eine Tiefe im Bereich von 10 m bis 70 m begrenzt sind) und den Modellergebnissen ist gut. Selbst Details der Temperaturstruktur, wie ein Rückgang der oberflächennahen Temperatur und eine Ost-West-Schichtung und die Schärfe des Temperatursprungs in der Region der Thermokline, sind gut reproduziert. Letzteres ist nur aufgrund der starken Akkumulation der Koordinatenschichten in der Thermokline-Region möglich, die eine vertikale Auflösung von örtlich weniger als 0,2 m zulässt (Abb. 2c). Die Wirbelviskosität in der ausgeprägten Thermokline liegt generell oberhalb von $10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$. Neben der hohen vertikalen Auflösung führt auch die Verwendung angepasster Vertikalkoordinaten zu einer starken Reduzierung der künstlichen numerischen Vermischung (siehe auch Kap. 4.2), welche in Modellen mit geopotentiellen

Koordinaten die diapkyknische Vermischung und die damit verbundenen Nährstoffflüsse dominieren würde.

4.2 Physikalische und numerische Vermischung in der westlichen Ostsee

Die Erstellung eines numerischen Modells der Ostsee ist eine anspruchsvolle Aufgabe. Für Simulationen der Ostsee muss eine Vielzahl an Phänomenen reproduziert werden: der Wassermassenaustausch durch die engen und flachen Dänischen Meerengen, die unregelmäßige Überflutung der Darßer Schwelle und der Drogden Schwelle, aufkommende Dichteströmungen, durch die Bodenwasser in die Kette von Becken in der zentralen Ostsee gelangt, die Überlappung von Einstömen auf dem richtigen Dichteniveau, und die niedrigen Vermischungsniveaus während Stagnationsperioden in den tiefen Becken. Diese unterschiedlichen Anforderungen verlangen ein sorgfältig kalibriertes Ozeanzirkulationsmodell mit einer gut kalibrierten Turbulenzschließung (Kap. 2.1). Die gute Eignung des mit dem General Ocean Turbulence Model (GOTM) gekoppelten General Estuarine Transport Model (GETM) als numerische Modellfamilie zur Bewältigung dieser Herausforderungen wurde in verschiedenen Studien belegt (BURCHARD et al. 2009; HOFMEISTER et al. 2011). So stellten HOFMEISTER et al. (2011) beispielsweise ein validiertes Modell für die gesamte Ostsee mit einer Auflösung von 1 Seemeile vor. Es ist möglich, zur Untersuchung der lokalen und sub-mesoskaligen Prozesse Modelle mit einer höheren Auflösung in solche grob aufgelösten Modelle einzubetten. In diesem Kapitel werden Ergebnisse aus einem 600 m-Modell der westlichen Ostsee vorgestellt (zum Modellgebiet siehe Abb. 1). An den offenen Rändern im Kattegat und östlich des Bornholmer Beckens sind der Verlauf der Wasseroberfläche, die tiefenintegrierten Geschwindigkeiten sowie die Profile für Temperatur und Salzgehalt durch das grob aufgelöste NSBS-Modell vorgegeben. Die Simulation erfolgte mit 40 adaptiven Schichten. Dadurch wurde eine hohe vertikale Auflösung in den Grenzschichten und auch in der sich entwickelnden Thermokline und Halokline erzielt. Mit diesen Einstellungen war eine akkurate Simulation der dynamischen Bedingungen in der westlichen Ostsee möglich. Abb. 3 zeigt die Validierung gegenüber den im Arkonabecken erhobenen Mooring-Daten (siehe Abb. 1 für den Standort dieser unabhängigen Boje). Dennoch ist die simulierte effektive Vermischung und Dissipation wie in Kap. 3 begründet nicht nur das Ergebnis der Auswirkungen der Sub-Grid-skaligen Parametrisierungen (physikalischer Anteil), sondern auch der Abbruchfehler der diskreten Advektionsterme (numerischer Anteil), siehe KLINGBEIL et al. (2014). Abb. 4 zeigt das Verhältnis der numerischen zur physikalischen Salzvermischung und das Verhältnis der numerischen zur physikalischen Dissipation kinetischer Energie entlang des in Abb. 1 dargestellten Transekts. In großen Gebieten lag eine numerisch bedingte Vermischung in derselben Größenordnung wie die physikalische Vermischung vor. Die numerisch induzierte Dissipation kinetischer Energie hingegen war um mindestens eine Größenordnung kleiner als die physikalische Dissipation. Diese Ergebnisse verdeutlichen sowohl die Notwendigkeit akkurater Advektionsschemata mit reduzierter numerischer Vermischung als auch die Relevanz gut kalibrierter Turbulenzparametrisierungen für die (physikalische) Dissipation kinetischer Energie.

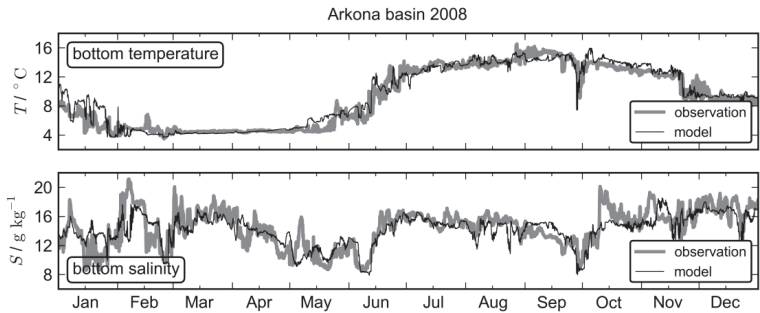


Abbildung 3: Vergleich der Zeitreihen für beobachtete und simulierte Temperatur- und Salzgehaltswerte im Bodenwasser des Arkonabeckens im Jahr 2008. Die Beobachtungsdaten stammen von der in Bodennähe (48 m Tiefe) installierten CTD-Sonde der MARNET-Station (Arkona-Boje) in der Arkonasee (zum genauen Standort siehe Abb. 1).

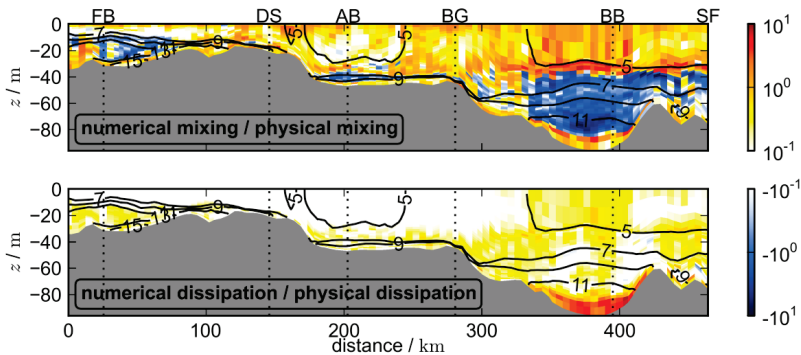


Abbildung 4: Verhältnis der numerischen zur physikalischen Salzvermischung und Verhältnis der numerischen zur physikalischen Dissipation kinetischer Energie entlang des in Abb. 1 gezeigten Transekts. Die Isopyknen sind als Konturlinien dargestellt. Die Daten sind über den Zeitraum 19.-28. September 2008 gemittelt. Die vertikalen Linien sind Positionsangaben für den Fehmarnbelt (FB), die Darßer Schwellen (DS), das Arkonabecken (AB), Bornholmssgat (BG), das Bornholmer Becken (BB) und die Stolper Schwellen (SF).

4.3 Beckenweite Vermischung in der zentralen Ostsee

Die zentrale Ostsee ist ähnlich wie die Ostsee insgesamt durch eine Kette von durch Schwellen miteinander verbundenen Becken charakterisiert. Die Hauptrolle nimmt hier das Gotlandbecken ein, eines der tiefsten (mit einer Tiefe von bis zu 240 m) und, im Hinblick auf das Wasservolumen, größten Becken der Ostsee.

Im Gegensatz zur Nordsee sind Tiden in der zentralen Ostsee so gut wie nicht vorhanden (FEISTEL et al. 2008) und entsprechend ist der Windantrieb die Hauptursache für die Vermischung. Während jedoch der obere Bereich der Wassersäule einem direkten Windeinfluss und atmosphärischen Temperaturveränderungen ausgesetzt ist, wird die Turbulenz und Vermischung in den tieferen Bereichen der Wassersäule durch die Schichtung verhindert – selbst im Winter reicht die Oberflächenvermischung nur bis zur Halokline in etwa 80 m Tiefe. Die Halokline bezeichnet den Übergang von den salzärme-

ren oberen Wasserschichten mit einem Salzgehalt von etwa 8 g/kg zu den tieferen Bereichen mit Salzgehalten von bis zu 13 g/kg. Die Erwärmung des Oberflächenwassers im Frühjahr und Sommer führt zur Bildung einer zweiten Dichtesprungschicht, der Thermokline. Infolge des atmosphärischen Antriebs verhindert die Thermokline die Vermischung zwischen dem kälteren Winterwasser oberhalb der Halokline und unterhalb der Thermokline.

Die vertikale Durchmischung unterhalb der Halokline beziehungsweise Thermokline unterscheidet sich folglich von der oberflächennahen Vermischung hinsichtlich der Antriebsprozesse. Die Auswirkungen eines Windereignisses, beispielsweise eines Sturms beginnen, ausgehend von der Vermischung des Tiefenwassers, mit der Anregung verschiedener Tiefenwasserbewegungen (z. B. interne und durch die Wechselwirkung mit der Topographie erzeugte Wellen). Diese Bewegungen verlieren ihre Energie durch Bodenreibung und innere Reibung sowie, in geringerem Maße, durch Vermischung (also die Umwandlung kinetischer Energie in Background Potential Energy). Anders als bei der Vermischung in der Oberflächenschicht besteht bei der Vermischung des Tiefenwassers über die oben beschriebene Prozesskette nur eine indirekte Verbindung zum Windantrieb. AXELL (1998) konnte zeigen, dass die Tiefenwasservermischung im Gotlandbecken in der stürmischeren Wintersaison zunahm; HOLTERMANN und UMLAUF (2012) stellten Korrelationen zwischen Einzelsturmereignissen und erhöhten Vermischungsraten her. Zahlreiche Prozesse im Tiefenwasser sind bekannt. Abb. 2 (REISSMANN et al. 2009) beispielsweise bietet einen guten Überblick über die Vermischungsprozesse in der Ostsee. Weniger bekannt hingegen ist die Bedeutung der verschiedenen Vorgänge für die Vermischung des Tiefenwassers.

Eine Studie über die wichtigsten Vermischungsprozesse und Vermischungsraten in den tieferen Regionen der zentralen Ostsee wurde 2007 durchgeführt: im sogenannten Baltic Sea Tracer Release Experiment (BaTRE) wurde ein passiver Tracer in 200 m Tiefe im zentralen Gotlandbecken freigesetzt (ungefähr an der Position C1 in Abb. 5). Das für den Versuch verwendete inerte Gas CF_3SF_5 ist auch in sehr niedrigen Konzentrationen detektierbar und ermöglichte eine Verfolgung des Tracer Patches über eine Zeitspanne von zwei Jahren. In Verbindung mit der Injektion des Tracers wurden auch mehrere Mooring-Stationen im Gotlandbecken installiert und in derselben Zeit Messungen der Turbulenzmikrostruktur durchgeführt (UMLAUF et al. 2008; HOLTERMANN et al. 2012; HOLTERMANN und UMLAUF 2012). Eines der wichtigsten Ergebnisse aus dem Versuch waren die signifikanten Unterschiede zwischen der vom Tracer Patch wahrgenommenen vertikalen turbulenten Diffusivität zu Beginn und in den späteren Phasen des Versuchs. Diese Unterschiede wurden auf den Einfluss von Randvermischungsprozessen zurückgeführt, welche nach dem ersten Randkontakt auf die Tracer-Wolke einzuwirken begannen, sodass die vertikale Ausbreitung des Tracers extrem zunahm. Dieses Ergebnis deckte sich mit den direkten Messungen der turbulenten Dissipationsrate mittels frei sinkendem Profiler zur Messung der Scherungs-Mikrostruktur.

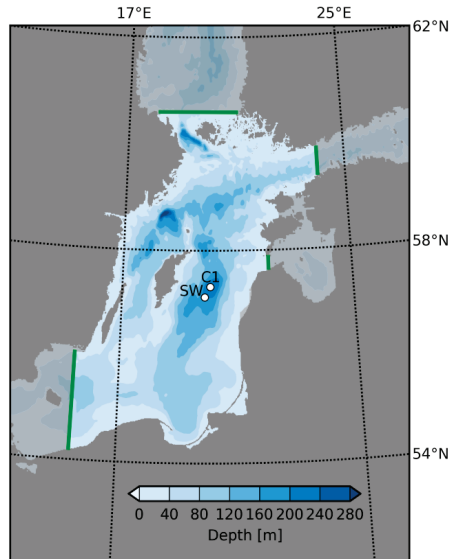


Abbildung 5: Modellgebiet des GETM-Modells für die zentrale Ostsee. Die grünen Linien markieren die offenen Ränder. Die weißen Punkte stellen die Standorte der beiden Moorings im Gotlandbecken dar.

Für die numerische Modellierung bedeutet das Ergebnis, dass das Modell im besten Fall fähig sein sollte, diese verschiedenen Vermischungsbedingungen zu reproduzieren. In dieser Hinsicht gute Ergebnisse wurden mit einem Modellaufbau für die zentrale Ostsee unter Anwendung von GETM mit 200 vertikal adaptiven Schichten und einer horizontalen Auflösung von 600 m erreicht, siehe HOLTERMANN et al. (2014). Diese Auflösung ist im Vergleich zu den meistens verwendeten Ostseemodellen relativ hoch – üblich sind horizontale Gittergrößen von 1 bis 2 Seemeilen oder gröber (siehe z. B. FENNEL et al. 2010). Mit dem Modell war es möglich, die Unterschiede zwischen der geringen Vermischung im Inneren der Wassersäule und der erhöhten Vermischung an den Beckenrändern und somit die Entwicklung der Tracer-Wolke zu reproduzieren.

Die Modellergebnisse für Salzgehalt, Temperatur und turbulente Diffusivität unter typischen Sommerbedingungen an den Stationen C1 und SW sind Abb. 6 zu entnehmen. Der erwärmte obere Bereich der Wassersäule oberhalb einer Schicht mit kälterem Winterwasser, die zwischen der Thermokline und Halokline liegt, ist deutlich sichtbar. Die turbulenten Diffusivitäten in den oberen Schichten liegen zwischen $1 \cdot 10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ und $5 \cdot 10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$. Unter dem Winterwasser überschreiten die turbulenten Diffusivitäten selten $10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$. Darin zeigt sich die mechanische Isolation der tieferen Schichten vom direkten atmosphärischen Antrieb. Unmittelbar über dem Boden jedoch nehmen die turbulenten Diffusivitäten bedingt durch die Bodenreibung wieder zu. Der Vergleich der Wirbeldiffusivitätsprofile der Messstationen SW und C1 in Abb. 6c verdeutlicht sehr gut, dass die erhöhten turbulenten Diffusivitäten an den Bodenrändern in unterschiedlichen Tiefen zu beobachten sind. Diese laterale Inhomogenität zwischen der niedrigen K_p bei C1 und der erhöhten K_p bei SW in 210 m Tiefe ist die Hauptursache der unterschiedlichen Ausbreitungsraten des passiven Tracers vor und nach Kontakt mit dem Rand des Beckens.

Durch die Verwendung von Modellergebnissen, die gegenüber einer Vielzahl von Beobachtungen im BaTRE-Versuch sorgfältig validiert wurden, war der Nachweis möglich, dass durch den atmosphärischen Antrieb ein Spektrum interner Wellen und sub-inertialer Bewegungen ausgelöst wurde, die ihrerseits als Haupttreiber der Vermischung in der Randschicht wirkten. Nach erfolgreicher Reproduktion des Tracer-Versuchs zeigten die Ergebnisse auch die komplexe Wechselwirkung zwischen den vermischten Wassermassen an den Rändern und der internen Wassersäule.

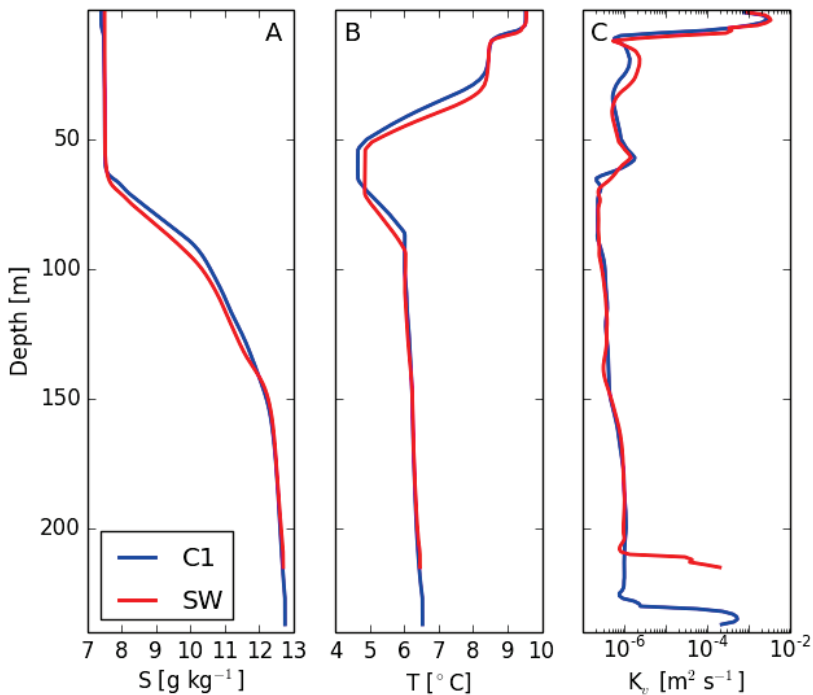


Abbildung 6: Salzgehalt (A), Temperatur (B) und turbulente Diffusivität (C) bei C1 (blau) und SW (rot), zum Standort der Messstationen s. a. Abb. 5. Die vom GETM-Modell der zentralen Ostsee gelieferten Daten stammen vom 1. Juni 2008 (Mitternacht).

5 Schlussfolgerungen

Diese Untersuchung zeigt die Notwendigkeit von hinreichend realistischen Turbulenzschließungsmodellen und hinreichend genauen numerischen Schemata für die Nutzung in Küstenozeanmodellen. Also optimale Lösung für diese Aufgabe wurden die Zweigleichungsmodelle für die Turbulenzschließung vorgestellt. Einfachere parametrische Turbulenzschließungsmodelle wie das KPP-Modell (LARGE et al. 1994), die häufig in großmaßstäblichen Ozeanmodellen verwendet werden, würden die dynamischen Prozesse der Schichtung und Vermischung mit angemessener Genauigkeit reproduzieren. Die komplexeren Modelle werden zumeist nur in idealisierten Zusammenhängen verwendet und wurden für realistische 3D-Modelle des Küstenozeans beschrieben. Bei den meisten Anwendungen für Küstenozeanmodelle ist die korrekte Reproduktion der

Vermischungseffizienz die wesentliche Voraussetzung für eine Vorhersagbarkeit des Zustands des Küstenozeans. Dies beinhaltet bei den im vorliegenden Beitrag vorgestellten Modellanwendungen die Unterdrückung der Vermischung in der saisonalen Thermokline, das Entrainment in dichte Bodenströmungen sowie die beckenweite Vermischung. Andere Küstenozeanprozesse, die in einer kritischen Beziehung zur Vermischungseffizienz stehen, sind beispielsweise die ästuarine Zirkulation, die Wechselwirkungen zwischen Sedimenten und Strömung bei hohen Sedimentkonzentrationen oder das Entrainment des umgebenden Wassers in Flussfahnen. Die erforderliche numerische Auflösung lässt sich hier insbesondere über angepasste Vertikalkoordinaten erreichen, die eine hohe Auflösung in Regionen mit starken Scherungs- oder Schichtungserscheinungen ermöglichen. Diese Vorgehensweise ist natürlich nur wirkungsvoll, wenn hinreichend korrekte Advektionsschemata verwendet werden. Andere (nicht-adaptive) Möglichkeiten, eine hohe vertikale Auflösung zu erreichen, bestehen beispielsweise in der Verwendung einer großen Zahl an vertikalen Schicht (was häufig den Rechenaufwand zu groß werden lässt) oder in der Nutzung geopotentieller Koordination mit lateraler Auflösungsvariation (BACKHAUS 2008). Dies wurde jedoch bislang nicht mit einer Ankopplung an Turbulenzschließungsmodelle getestet. Eine weitere Möglichkeit ist die Verwendung unstrukturierter adaptiver Finiter Elemente in der Vertikalen (PIGGOTT et al. 2008), eine Methode, die in der Ozeanmodellierung noch in den Kinderschuhen steckt.

Danksagung: Für die deutsche Beteiligung am Ostsee Monitoringprogramm COMBINE und den Betrieb der in der Ostsee befindlichen Messstationen des Marinen Umweltmessnetzes in Nord- und Ostsee (MARNET) ist das Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde (IOW) im Auftrag des Bundesamts für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH) zuständig. Die Finanzierung erfolgt durch das Bundesministerium für Verkehr, Bau und Stadtentwicklung (BMVBS).

6 Schriftenverzeichnis

- AXELL, L. B.: On the variability of Baltic Sea deep water mixing, *J. Geophys. Res.*, 103(C10), 21, 667-21,682, doi: 10.1029/98JC01714, 1998.
- BACKHAUS, J. O.: Improved representation of topographic effects by a vertical adaptive grid in vector-ocean-model (VOM). Part I: Generation of adaptive grids, *Ocean Modelling*, 22, 114-127, 2008.
- BAUMERT, H. and PETERS, H.: Second-moment closures and length scales for weakly stratified turbulent shear flows, *J. Geophys. Res.*, 105, 6453-6468, 2000.
- BECHERER, J.; BURCHARD, H.; FLÖSER, G.; MOHRHOLZ, V. and UMLAUF, L.: Evidence of tidal straining in well-mixed channel flow from micro-structure observations, *Geophys. Res. Lett.*, 38, L17611, doi: 10.1029/2011GL049005, 2011.
- BLUMBERG, A. F. and MELLOR, G. L.: A description of a coastal ocean circulation model. In: HEAPS, N. S. (Ed.), *Three Dimensional Ocean Models*. American Geophysical Union, Washington, D.C., 1-16, 1987.
- BURCHARD, H.: Applied turbulence modelling in marine waters, vol. 100 of *Lecture Notes in Earth Sciences*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 229 pp., 2002.
- BURCHARD, H. and BAUMERT, H.: On the performance of a mixed layer model based on the k-ε turbulence closure, *J. Geophys. Res.*, 100, 8523-8540, 1995.

- BURCHARD, H. and BOLDING, K.: Comparative analysis of four second-moment turbulence closure models for the oceanic mixed layer. *J. Phys. Oceanogr.*, 31, 1943-1968, 2001.
- BURCHARD, H.; BOLDING, K.; RIPPETH, T. P.; STIPS, A.; SIMPSON, J. H. and SÜNDERMANN, J.: Microstructure of turbulence in the northern North Sea: a comparative study of observations and model simulations, *J. Sea. Res.*, 47, 223-238, 2002.
- BURCHARD, H.; DELEERSNIJDER, E. and STOYAN, G.: Some numerical aspects of turbulence-closure models, 197-206. In: BAUMERT, H. Z.; SIMPSON, J. H. and SÜNDERMANN, J. (eds.), *Marine Turbulence: Theories, Observations and Models*, Cambridge University Press, Cambridge, 630 pp., 2005.
- BURCHARD, H. and HETLAND, R. D.: Quantifying the contributions of tidal straining and gravitational circulation to residual circulation in periodically stratified tidal estuaries, *J. Phys. Oceanogr.*, 40, 1243-1262, 2010.
- BURCHARD, H.; JANSSEN, F.; BOLDING, K.; UMLAUF, L. and RENNAU, H.: Model simulations of dense bottom currents in the Western Baltic Sea. *Cont. Shelf Res.*, 29, 205-220. 2009.
- BURCHARD, H. and PETERSEN, O.: Models of turbulence in the marine environment – a comparative study of two-equation turbulence models, *J. Mar. Syst.*, 21, 29-53, 1999.
- BURCHARD, H.; PETERSEN, O. and RIPPETH, T. P.: Comparing the performance of the k- ϵ and the Mellor-Yamada two-equation turbulence models, *J. Geophys. Res.*, 103, 10543-10554, 1998.
- BURCHARD, H. and RENNAU, H.: Comparative quantification of physically and numerically induced mixing in ocean models, *Ocean Modelling*, 20, 293-311, 2008.
- CANUTO, V. M.; HOWARD, A.; CHENG, Y. and DUBOVIKOV, M. S.: Ocean turbulence. Part I: one-point closure model. Momentum and heat vertical diffusivities. *J. Phys. Oceanogr.*, 31, 1413-1426, 2001.
- CHARNEY, J. G.: Geostrophic Turbulence, *J. Atmos. Sci.*, 28, 1087-1095, 1971.
- CHEN, C.; LIU, H. and BEARDSLEY, R. C.: An unstructured, finite-volume, three-dimensional, primitive equation ocean model: application to coastal ocean and estuaries. *J. Atmos. Ocean. Tech.*, 20, 159-186, 2002.
- FEISTEL, R.; NAUSCH, G. and WASMUND, N. (Eds.): *State and Evolution of the Baltic Sea, 1952-2005. A detailed 50-year survey of meteorology and climate, physics, chemistry, biology, and marine environment*, 703 pp., Wiley-Interscience, Hoboken, NJ, USA, 2008.
- FENNEL, W.; RADTKE, H.; SCHMIDT, M. and Neumann, T.: Transient upwelling in the central Baltic Sea, *Cont. Shelf Res.*, 30(19), 2015-2026, doi: 10.1016/j.csr.2010.10.002, 2010.
- FOX-KEMPER, B.; FERRARI, R. and HALLBERG, R.: Parameterization of mixed layer eddies. Part I: Theory and diagnosis, *J. Phys. Oceanogr.*, 38, 1145-1165, 2008.
- GALPERIN, B.; KANTHA, L. H.; HASSID, S. and ROSATI, A.: A quasi-equilibrium turbulent energy model for geophysical flows. *J. Atmos. Sci.*, 45, 55-62, 1988.
- HOFMEISTER, R.; BECKERS, J.-M. and BURCHARD, H.: Realistic modelling of the exceptional inflows into the central Baltic Sea in 2003 using terrain-following coordinates. *Ocean Modelling*, 39, 233-247, 2011.

- HOFMEISTER, R.; BURCHARD, H. and BECKERS, J.-M.: Non-uniform adaptive vertical grids for 3D numerical ocean models, *Ocean Modelling*, 33, 70-86, 2010.
- HOLT, J. T. and JAMES, I. D.: An assessment of the fine-scale eddies in a high-resolution model of the shelf seas west of Great Britain, *Ocean Modelling*, 13, 271-291, 2006.
- HOLT, J. and UMLAUF, L.: Modelling the tidal mixing fronts and seasonal stratification of the Northwest European Continental shelf, *Cont. Shelf Res.*, 28, 887-903, 2008.
- HOLTERMANN, P.; UMLAUF, L.; TANHUA, T.; SCHMALE, O.; REHDER, G. and WANIEK, J.: The Baltic Sea Tracer Release Experiment. Part 1: Mixing rates, *J. Geophys. Res.*, 117, C01,021, doi: 10.1029/2011JC007439, 2012.
- HOLTERMANN, P. and UMLAUF, L.: The Baltic Sea Tracer Release Experiment. Part 2: Mixing processes, *J. Geophys. Res.*, 117, C01,022, doi: 10.1029/2011JC007445, 2012.
- HOLTERMANN, P.; BURCHARD, H.; GRÄWE, U.; KLINGBEIL, K. and UMLAUF, L.: Deep-water dynamics and boundary mixing in a non-tidal stratified basin. A modeling study of the Baltic Sea, *J. Geophys. Res. Oceans*, 119, doi: 10.1002/2013JC009483, 2014.
- KÄRNÄ, T.; LEGAT, V.; DELEERSNIJDER, E. and BURCHARD, H.: Coupling of a discontinuous Galerkin finite element marine model with a finite difference turbulence closure model, *Ocean Modelling*, 47, 55-64, 2012.
- KLINGBEIL, K.; MOHAMMADI-ARAGH, M.; GRÄWE, U. and BURCHARD, H.: Quantification of spurious dissipation and mixing – Discrete Variance Decay in a Finite-Volume framework, *Ocean Modelling*, doi: 10.1016/j.ocemod.2014.06.001, 2014.
- KOLMOGOROV, A. N.: The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30, 301-305, 1941. Reprinted in: *Proc. R. Soc. Lond. A*, 434, 9-13, 1991.
- LARGE, W. G.; MCWILLIAMS, J. C. and DONEY, S. C.: Oceanic vertical mixing: a review and a model with nonlocal boundary layer parameterisation, *Rev. Geophys.*, 32, 363-403, 1994.
- LEITH, C. E.: Stochastic models of chaotic systems, *Physica D*, 98, 481-491, 1996.
- MELLOR, G. L. and YAMADA, T.: Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys. Space Phys.* 20, 851-875, 1982.
- MENEMENLIS, D.; HILL, C.; ADCROFT, A.; CAMPIN, J.-M.; CHENG, B.; CIOTTI, B.; FUKUMORI, I.; HEIMBACH, P.; HENZE, C.; KÖHL, A.; LEE, T.; STAMMER, D.; TAFT, J. and ZHANG, J.: NASA supercomputer improves prospects for ocean climate research, *Am. Geophys. Union*, 86(9), 95-96, 2005.
- OSBORN, T. R.: Estimates of the local rate of vertical diffusion from dissipation measurements. *J. Phys. Oceanogr.*, 10, 83-89, 1980.
- PATANKAR, S. V.: Numerical Heat Transfer and Fluid flow. McGraw-Hill, New York, 1980.
- PIGGOTT, M. D.; GORMAN, G. J.; PAIN, C. C.; ALLISON, P. A.; CANDY, A. S.; MARTIN, B. T. and WELL, M. R.: A new computational framework for multi-scale ocean modelling based on adapting unstructured meshes, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56, 1003-1015, 2008.
- REISSMANN, J.; BURCHARD, H.; FEISTEL, R.; HAGEN, E.; LASS, H. U.; MOHRHOLZ, V.; NAUSCH, G.; UMLAUF, L. and WIECZOREK, G.: State-of-the-art review on vertical

- mixing in the Baltic Sea and consequences for eutrophication, *Progr. Oceanogr.*, 82, 47-80, 2009.
- RODI, W.: Turbulence models and their applications in hydraulics, Tech. Rep., Int. Assoc. for Hydraul. res., Delft, The Netherlands, 1980.
- SHCHEPETKIN, A. F. and MCWILLIAMS, J. C.: The Regional Ocean Modeling System: A split-explicit, free-surface, topography following coordinates ocean model, *Ocean Modelling*, 9, 347-404, 2005.
- SMAGORINSKY, J.: General circulation experiments with the primitive equations, *Month. Weather Rev.*, 91, 99-164, 1963.
- UMLAUF, L.; ARNEBORG, L.; BURCHARD, H.; FIEKAS, V.; LASS, H. U.; MOHRHOLZ, V. and PRANDKE, H.: The transverse structure of turbulence in a rotating gravity current, *Geophys. Res. Lett.*, 34, L08601, doi: 10.1029/2007GL029521, 2007.
- UMLAUF, L. and BURCHARD, H.: A generic length-scale equation for geophysical turbulence models, *J. Mar. Res.*, 61, 235-265, 2003.
- UMLAUF, L. and BURCHARD, H.: Second-order turbulence closure models for geophysical boundary layers. A review of recent work, *Cont. Shelf Res.*, 25, 795-827, 2005.
- UMLAUF, L.; BURCHARD, H. and HUTTER, K.: Extending the k-omega turbulence model towards oceanic applications, *Ocean Modelling*, 5, 195-218, 2003.
- UMLAUF, L.; TANHUA, T.; WANIEK, J. J.; SCHMALE, O.; HOLTERMANN, P. and REHDER, G.: Hunting a new tracer, *EOS, Transactions American Geophysical Union*, 89 (43), 419-419, 2008.
- VAN DER LEE, E. M. and UMLAUF, L.: Internal-wave mixing in the Baltic Sea: Near-inertial waves in the absence of tides. *J. Geophys. Res.*, 116, C10016, doi: 10.1029/2011JC007072, 2011.
- WARNER, J. C.; SHERWOOD, C. R.; ARANGO, H. G. and SIGNELL, R. P.: Performance of four turbulence closure models implemented using a generic length scale method, *Ocean Modelling*, 8, 81-113, 2005.
- WILCOX, D. C.: Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA Journal*, 26, 1299-1310, 1988.
- ZHANG, Y. and BAPTISTA, A. M.: SELFE: A semi-implicit Eulerian-Lagrangian finite-element model for cross-scale ocean circulation. *Ocean Modelling*, 21, 71-96, 2008.