

Methoden der Datenassimilation

Emil Stanev und Johannes Schulz-Stellenfleth

Zusammenfassung

Es wird eine Übersicht über Vorhersagemethoden in der Ozeanographie, die auf numerischen Modellen, Beobachtungen und Datenassimilationstechniken basieren, gegeben. Die Grundlagen der Datenassimilation als eine Anwendung der Schätz- und Kontrolltheorie werden beschrieben und die zugehörigen statistischen und numerischen Methoden eingeführt. Klassische Verfahren wie der Kalman Filter oder Optimale Interpolation werden ebenso wie neuartige Ansätze wie der „reduced rank filter“ oder „smoother“ erläutert. Probleme und Herausforderungen werden angesprochen, die charakteristisch sind für Vorhersagen im Küstenbereich. Dazu gehören die folgenden Punkte: komplexe Physik, die die Datenassimilation erschwert; charakteristische Zeitskalen; starke Schockeffekte bei der sequentiellen Datenassimilation, wenn Modelle neu gestartet werden; spezielle Daten- und Beobachtungsplattformen im Küstenbereich und optimale Nutzung von Synergien zwischen verschiedenen Daten; schwierige Spezifizierung von Modell- und Beobachtungsfehlern; Kopplung von Modellen für den Küsten- und den Tiefwasserbereich und der nahtlose Übergang zwischen den verschiedenen räumlichen Skalen. Einige dieser Herausforderungen und ihre Behandlung werden für den Bereich der Deutschen Bucht veranschaulicht durch die Beschreibung eines prä-operationellen HF Radar Datenassimilationssystems, das drei WERA Stationen verwendet, sowie ein Assimilationssystem, das FerryBox Messungen von Temperatur und Salzgehalt an der Meeresoberfläche benutzt.

Schlagwörter

Kalman-Filter, 4D-VAR, Smoother, Vorhersagen im Küstenbereich, Modell- und Beobachtungsfehler, Deutsche Bucht

Summary

An overview of ocean forecasting techniques amalgamating numerical models, observations and data assimilation methods is presented. The basics of data assimilation as an application of estimation theory or control theory is described and the corresponding statistical and numerical methods are introduced. Classical approaches like Kalman filter or optimal interpolation are explained as well as state-of-the-art methods such as reduced rank filters and smoother approaches. The problems and challenges of coastal ocean forecasting are identified, which are associated with the specific variables of interest for coastal applications such as: complex physics complicating the assimilation of data; characteristic time scales; vigorous adjustment process arising in sequential data assimilation, when models are restarted; specific data and observational platforms in coastal ocean and maximising the outcome of synergies between different data types; model and observation error specification; coupling coastal and deep ocean models and seamless transition between coastal and open-ocean scales. Illustrations of some of the above challenges and their treatment in the area of the German Bight are given by describing a pre-operational HF radar data assimilation system using three WERA stations, as well as an assimilation system using FerryBox surface temperature and salinity measurements.

Keywords

Kalman filter, variational data assimilation, smoothers, coastal ocean forecasting, model and observation errors, German Bight

Inhalt

1	Einleitung	144
2	Methoden	147
2.1	Grundlegende Konzepte.....	147
2.2	Direct Insertion und Newtonian Relaxation.....	148
2.3	Sequenzielle Ansätze	148
2.3.1	Optimale Interpolation	148
2.3.2	Kalman-Filter.....	149
2.3.3	Ensemble-Verfahren	149
2.3.4	Reduzierung von Zustands- und Fehlerunterräumen.....	150
2.3.5	Die dreidimensionale Analyse (3D-VAR).....	151
2.4	Ansätze mit Smoothern.....	151
2.4.1	Allgemeine Darstellung.....	151
2.4.2	Die vierdimensionale Analyse (4D-VAR).....	151
2.4.3	Ensemble Smoother: Optimierung von Randbindungen und meteorologischem Antrieb	152
3	Datenassimilation im Küstenozean: Anwendungsbeispiele aus der Deutschen Bucht.....	153
3.1	Spezifische Probleme der Datenassimilation im Küstenozean.....	153
3.2	Assimilation von FerryBox-Daten zu Temperatur und Salzgehalt an der Meeresoberfläche	155
3.3	OI mit zeitlich/räumlicher Komponente (STOI): ein Schritt in Richtung „beste Schätzung der Oberflächenströmung“.....	157
3.4	Potenzieller Nutzen von operationellen Produkten zur Messung von Oberflächenströmungen	158
4	Schlussfolgerungen und zukünftige Herausforderungen	159
5	Danksagung.....	160
6	Schriftenverzeichnis.....	160

1 Einleitung

Bei der Datenassimilation in der Ozeanographie werden Beobachtungen und Modelle mit dem Ziel zusammengeführt, (1) ein besseres Verständnis der Ozeanzirkulation auf allen relevanten zeitlichen und räumlichen Skalen zu erlangen sowie (2) den Ozeanzustand überwachen und (3) vorhersagen zu können. Durch die Kombination von Beobachtungen

mit numerischen Simulationen sind effiziente, präzise und realistische Zustandsschätzungen möglich. Ohne Datenassimilation wären zudem keine Zustandsschätzungen mit zeitlicher und räumlicher Abtastung sowie mit räumlicher Abdeckung von praktischem Interesse möglich, da die Datenerhebung im Ozean, insbesondere über einen langen Zeitraum hinweg, schwierig und kostenaufwändig ist. Die Datenassimilation liefert vierdimensionale Zeitreihen dynamisch angepasster Felder, die in Form von hochauflösenden und kompletten Datensätzen (Beobachtungs- und Modelldaten gemischt) in Analysen der Systemdynamik verwertbar sind. Damit geht sie über traditionelle methodologische Ansätze hinaus, in denen sich Beobachtungen und Theorie unabhängig voneinander entwickelten oder bestenfalls ohne Nutzung von Synergien parallel entwickelt wurden.

Bei der Datenassimilation besteht die Herausforderung darin, die wichtigsten Informationen aus den relativ wenigen und durch verschiedene Störquellen verrauschten Beobachtungen zu extrahieren und diese bestmöglich in die numerischen Vorhersagemodelle einzuspeisen. Die Beobachtungsfehler sind auf Geräterauschen, Abtastungsfehler und eventuelle Fehlinterpretationen der Messungen zurückzuführen. Selbstverständlich sind auch numerische Ozeanmodelle nicht fehlerfrei: Fehler resultieren aus unvollständiger (fehlerbehafteter) Modellphysik, unzureichender Gitterauflösung, Problemen mit offenen Randbedingungen sowie atmosphärischen oder hydrologischen Antrieben. Selbst „perfekte“ Ozeanmodelle entfernen sich im Rahmen einer Vorhersage von der Realität. Hierbei wird von einer Grenze der Vorhersagbarkeit gesprochen. Diese Grenze hängt von der Art der geophysikalischen Fluide und dominierenden Prozesse ab. Für synoptische Prozesse im Ozean liegt sie in einer Größenordnung von Wochen bis Monaten, für den Küstenozean in einer Größenordnung von Stunden und Tagen. Der Verlust der Vorhersagbarkeit geht einher mit einer nichtlinearen Übertragung und Zunahme von Fehlern.

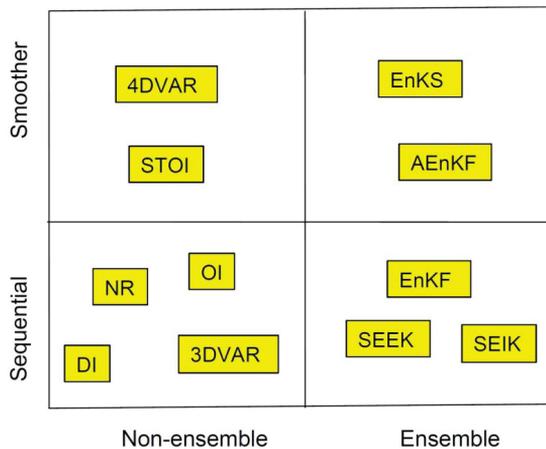


Abbildung 1: Schematische Darstellung verschiedener Assimilationsmethoden. Die Abkürzungen werden in Kapitel 2 erläutert. Die Methoden Direct Insertion (DI) und Newtonian Relaxation (NR) sind zwar im Feld links unten aufgeführt, stellen aber keine typischen sequenziellen Methoden, wie sie heute verwendet werden, dar.

Angesicht der oben dargelegten grundlegenden Eigenschaften geophysikalischer Systeme erweist sich die Erstellung präziser Vorhersagen als schwierig. Ihre Entwicklung muss mit Hilfe von Beobachtungen mit geeigneter räumlicher Abdeckung und in Intervallen

unterhalb der Grenze der Vorhersagbarkeit regelmäßig korrigiert werden. Für den Korrekturprozess müssen multivariate Aspekte der zu kombinierenden Modell- und Beobachtungsdaten bekannt sein. Ein grundlegendes Problem bei der Datenassimilation ist die Angabe der Kovarianzmatrizen für Modell- und Beobachtungsfehler. Sie bestimmen, wie die Daten aus den Beobachtungen in das Modell übertragen werden. Wenn diese Angabe vollständig ist und korrekt verwendet wird, können Beobachtungen, die für eine Modellvariable vorliegen, dynamisch konsistente Korrekturen in anderen Modellvariablen oder -bereichen, die nicht gemessen werden, generieren.

Im Laufe der letzten Jahre haben die Assimilations- und Vorhersageverfahren für Ozeandaten einen eindrucksvollen Reifegrad erreicht (CHASIGNET und VERRON 2006). Ein gutes Beispiel hierfür ist das Global Ocean Data Assimilation Experiment (GODAE). Aus diesem Projekt gingen zahlreiche Systeme hervor, die u. a. vom australischen Bureau of Meteorology (BLUElink Ocean Data Assimilation System, BODAS), dem Jet Propulsion Laboratory (Estimating the Circulation and Climate of the Ocean, ECCO), dem UK Met Office (Forecast Ocean Assimilation Model, FOAM) sowie dem in mehreren EU-Ländern ins Leben gerufenen MyOcean-Projekt (Nucleus for European Modeling of the Ocean VARIational Data Assimilation, NEMOVAR) betrieben werden (CUMMINGS et al. 2009). Die oben genannten GODAE-Systeme assimilieren verschiedenste Messdaten, darunter von Satellitenaltimetern erhobene Daten zu Meeresspiegelanomalien, von Argo-Floats, verankerten oder treibenden Bojen, XBTs (Expendable Bathythermographen) und CTD-Sonden (zur Messung von Leitfähigkeit, Temperatur und Tiefe) erhobene Daten zu Temperatur und Salzgehalt in der Wassersäule, in-situ oder per Satellit gemessene Daten zur Meeresoberflächentemperatur sowie per Satellit gemessene Daten zu Meereiskonzentration und Treibeis.

Bislang finden Datenassimilationsverfahren in der Ozeanographie Anwendung in operationellen Vorhersagen, Fehleranalysen, bei der Parameteroptimierung, in Untersuchungen von Ozeanprozessen und in der Planung neuer Beobachtungssysteme. Im letztgenannten als Observation System Simulation Experiments (OSSEs) bekannten Anwendungsbereich wird die Optimierung zukünftiger experimenteller oder operationeller Überwachungsnetze vorangetrieben. Im Vergleich zu den in der Meteorologie und der globalen Ozeanographie eingesetzten Methoden befinden sich die Vorhersageverfahren für die Küste noch in einer recht frühen Entwicklungsphase. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die zahlreichen spezifischen Probleme der Datenassimilation im Küstenozeanbereich in den globalen und regionalen Datenassimilationssystemen keine hinreichende Berücksichtigung finden. In der vorliegenden Studie sollen daher nach einer Erläuterung der Grundlagen der Datenassimilation die spezifischen Probleme im Küstenbereich benannt und einige Lösungsmöglichkeiten aufgezeigt werden. Die praktische Umsetzung zur Verdeutlichung verschiedener Ansätze erfolgt in der Deutschen Bucht, einem flachen, gezeitendominierten Bereich der südlichen Nordsee.

Kapitel 2 des vorliegenden Beitrags gibt eine Einführung in den theoretischen Hintergrund der Datenassimilation in der Ozeanographie. In Kapitel 3 werden Anwendungen in der Deutschen Bucht exemplarisch vorgestellt. Kapitel 4 schließlich enthält kurze Schlussfolgerungen.

2 Methoden

2.1 Grundlegende Konzepte

Die Datenassimilation in der Ozeanographie befasst sich mit der räumlichen Verteilung und zeitlichen Entwicklung von Zustandsgrößen (z. B. Geschwindigkeit, Druck, Dichte, Temperatur und Salzgehalt). Ziel ist die Einschätzung des Zustands in Abhängigkeit von drei Dimensionen unter Einbeziehung der Zeit. Mit ozeanographischen Vorhersagesystemen wird der zukünftige Zustand des Ozeans unter Zugrundelegung seines Zustand zu einer gegebenen Anfangszeit berechnet. Das Werkzeug zur Berechnung solcher Prognosen ist das dynamische (Zirkulations-) Modell. Dieses Modell ist die *erste Komponente von Vorhersagesystemen*. Es nimmt eine numerische Approximation prognostischer Feldgleichungen für Zustandsgrößen vor. Die Gleichungen enthalten Parameter (z. B. bezogen auf physikalische Vorgänge oder Fundamentalkonstanten) und werden durch die gegebenen Anfangsdaten und Randbedingungen initialisiert und angetrieben. Die für die Datenassimilation verwendeten dynamischen Modelle müssen die interne Dynamik des Ozeans und seine Reaktion auf externe Antriebe korrekt abbilden, das heißt, sie müssen die realen Vorgänge zumindest im statistischen Mittel gut wiedergeben.

Die *zweite Komponente von Vorhersagesystemen* ist ein Datenassimilationswerkzeug, mit dem die Zustandsgrößen des dynamischen Modells mit den Beobachtungen verknüpft werden. Ein solches Werkzeug muss die Daten dynamisch interpolieren und extrapolieren und Beobachtungen und Simulationen mit Gewichtungen verbinden, die umgekehrt proportional zu den jeweiligen Fehlern sind. Die Datenassimilation bedient sich der statistischen Schätztheorie und der Kontrolltheorie (Abb. 1). Zur ersten Theorie gehört der klassische Kalman-Filter (KF), der auf einer Wahrscheinlichkeitsmaximierung basiert. Die Kontrolltheorie betrachtet das Verhalten dynamischer Systeme, in denen eine oder mehrere Ausgangsgrößen im Laufe der Zeit einer bestimmten Referenzgröße folgen müssen. Aus diesem Grund werden die Eingangsgrößen so manipuliert, dass der gewünschte Effekt auf die Ausgangsgröße erzielt wird. Die 4DVAR-Methode ist in dieser Kategorie am gebräuchlichsten. Die *dritte Komponente von Vorhersagesystemen* besteht aus den verwendeten Beobachtungsnetzen, die für die Erfassung der dominierenden Vorgänge geeignet sein und eine ausreichende Genauigkeit gewährleisten müssen. Der vorliegende Beitrag konzentriert sich auf die zweite Komponente von Vorhersagesystemen.

Im Folgenden werden die Zustandsgrößen im Zeitschritt k als Vektor x_k der Dimension n bezeichnet. Die Beobachtungen der Dimension m zum Zeitpunkt k werden mit y_k^O bezeichnet. Es wird davon ausgegangen, dass die Entwicklung der Zustandsgrößen mit Hilfe eines dynamischen (Vorhersage-)Modells beschrieben wird:

$$x_{k+1}^f = Mx_k^a + \eta_k \quad (1)$$

Hierbei gilt: Der Index „f“ steht für Forecasting (Vorhersage). M ist ein Operator der Dimension $n \times n$. Er entspricht dem diskreten Schema, das einem gegebenen numerischen Modell zugeordnet ist. η_k steht für Gaußsches Rauschen mit Kovarianzmatrix Q_k .

Die Beziehung zwischen den Zustandsgrößen und den Messwerten wird mit Hilfe eines linearen Modells beschrieben:

$$y_k^O = Hx_k + \epsilon_k \quad (2)$$

Hierbei ist H der Beobachtungsoperator und ϵ_k steht für Gaußsches Messrauschen mit Kovarianzmatrix R , das häufig als „weißes“ Rauschen angenommen wird (d. h. R ist diagonal). Beobachtungsfehler ergeben sich aus Instrumentenrauschen und sogenannten Darstellungsfehlern, die modellabhängig sind. Welches relative Gewicht der Beobachtung beigemessen wird, hängt vom Umfang der Beobachtungsfehler in Kombination mit den Fehlern im numerischen Modell ab. Die Modellfehler werden durch die Fehlerkovarianzmatrix P beschrieben.

In den folgenden Kapiteln werden verschiedene Ansätze zur Suche nach einem sogenannten analysierten Zustand x^a beschrieben, bei dem eine optimale Kombination einer ersten Modellzustandsschätzung x^f mit den Messungen y^o gegeben ist. Die meisten Ansätze (Abb. 1) lassen sich als ein Problem der Minimierung einer Kostenfunktion formulieren, mit der einerseits die Abweichung zwischen Modell und Beobachtungen (die sogenannte Innovation) reduziert und andererseits die Abweichung von der ersten Schätzung möglichst klein gehalten wird.

2.2 Direct Insertion und Newtonian Relaxation

Die einfachste Form der Assimilation ist die Direct Insertion (DI). Hierbei werden die Vorhersagewerte an den Beobachtungspunkten durch Messwerte ersetzt. Da dies nur bei konsistenten Daten möglich ist, wie sie kaum jemals vorliegen, ist diese Methode nicht optimal. Im Vergleich dazu führt das Nudging- bzw. Newtonian Relaxation-Schema Terme in die prognostischen Gleichungen ein, die proportional zur Differenz zwischen den beobachteten Daten und den Zustandsgrößen (d. h. den Residuen) sind. Diese Methode „relaxiert“ das Modell in Richtung der Beobachtungen. Die Relaxationszeiten sollten mit den maßgeblichen Zeitreihen konsistent, jedoch nicht zu kurz sein, um Modellstörungen vorzubeugen.

2.3 Sequenzielle Ansätze

Bei den sequenziellen Methoden der Datenassimilation (BRASSEUR 2006) werden Vorhersage-/Analysezyklen wiederholt durchgeführt. Bei jedem Zeitschritt der Analyse wird für die nächste Vorhersage ein neuer Anfangszustand des Modells berechnet, der auf dem Modellzustand und den aktuell verfügbaren Beobachtungen basiert. In den folgenden Kapiteln werden verschiedene unter diese Kategorie fallende Ansätze beschrieben.

2.3.1 Optimale Interpolation

Die optimale Interpolation (OI) (GANDIN 1963; LORENC 1981; DALEY 1991) ist eine Vereinfachung des Kalman-Filters. Die Fehlerkovarianz der Prognose wird durch die Fehlerkovarianz der Hintergrundstatistik ersetzt. In einfacheren Implementierungen werden die im Filter verwendeten Gewichtungen empirisch zugewiesen. Diese Methode basiert auf der grundlegenden Hypothese, dass *für jede Modellvariable einige wenige Beobachtungen ausreichen, um das Analyse-Inkrement zu bestimmen*. Die Spezifikation der Matrix $-P$ hängt in der Regel von der Form der empirischen Autokorrelationsfunktionen (z. B. Gaußsche Funktionen) ab, die als zeitunabhängig gelten. Bei der OI-Methode wird denjenigen

Beobachtungen erhebliches Gewicht zugemessen, die eine signifikante Backgroundfehlerkovarianz aufweisen. In der praktischen Anwendung begrenzt der Korrelationsradius den geometrischen Bereich um die zu berücksichtigenden Modellgrößen.

2.3.2 Kalman-Filter

Die Schätzung des Zustandsvektors lässt sich als Maximierung einer *a posteriori*-Wahrscheinlichkeit des Systemzustands für gegebene Beobachtungen y_k^0 und für eine gegebene erste Schätzung des Modellzustands x_k^f formulieren. Die Schätztheorie (z. B. GELB 1974) besagt, dass die sogenannte Analyse x_k^a , die optimale Kombination von Modell und Beobachtung, gegeben ist durch

$$x_k^a = x_k^f + K_k \left(y_k^0 - Hx_k^f \right) \quad (3)$$

wobei

$$K_k = P_k^f H^T \left(HP_k^f H^T + R \right)^{-1} \quad (4)$$

die Kalman-Gain-Matrix ist. Der Filter kann daher als zweistufiges Verfahren betrachtet werden: (i) Die Vorhersage des Zustandsvektors und seiner Fehlerkovarianz werden berechnet als

$$x_k^f = Mx_{k-1}^a \quad (5)$$

$$P_k^f = MP_{k-1}^a M^T + Q_k \quad (6)$$

(ii) Die Analyse wird aus den Gleichungen (3) und (4) abgeleitet. Schließlich wird (iii) die a-posteriori-Kovarianz berechnet als

$$P_a^k = (I - K_k H) P_k^f \quad (7)$$

Der Analyseschritt ist eine lineare Verknüpfung der dynamischen Vorhersage x_k^f mit der Differenz zwischen Beobachtungsdaten und Modellvorhersagen $y_k^0 - Hx_k^f$, dem sogenannten Residualwert.

Daraus folgt, dass der KF (KALMAN 1960) eine Vereinfachung der Bayesschen Schätzung für lineare Systeme und daher nur für lineare Modelle optimal ist. Eine Linearisierung des Modells um die Zustandsschätzung herum führt zum sogenannten erweiterten Kalman-Filter (EK-Filter) (JAZWINSKI 1970).

Analysen mit dem KF sind möglich, wenn die Vorhersage- und Beobachtungsfehler bekannt und präzise angegeben sind. Da diese statistischen Daten im Allgemeinen nicht allgemein verfügbar sind, ist die Anwendung von Assimilationsalgorithmen oft nicht im strengen Sinne optimal (DEE und DA SILVA 1998).

2.3.3 Ensemble-Verfahren

Um die für den KF erforderliche Linearisierung des Modells zu umgehen, wurde eine weitere Variante des Kalman-Filters entwickelt, die auf Ensemble-Verfahren und Monte

Carlo-Methoden basiert. Diese als Ensemble KF (EnKF; EVENSEN 1994; BURGERS et al. 1998) bekannte Methode stellt die im EK-Filter gegebenen Fehlerstatistiken mit einem Ensemble von Modellzuständen dar. (Die Approximation der Kovarianz erfolgt durch Stichprobenkovarianzen.) Die Schätzung der strömungsabhängigen Backgroundfehlerkovarianz macht diese Methode zu einer guten Alternative zu den Variationsansätzen (siehe Kapitel 2.3.4).

2.3.4 Reduzierung von Zustands- und Fehlerunterräumen

Es ist nicht möglich, einen vollständigen Kalman-Filter in realistische Ozeanmodelle zu implementieren, da die Gleichungen für die Fehlervorhersage und -analyse zu anspruchsvoll und damit die CPU- und Speicheranforderungen zu hoch sind. OI hingegen führt zu einer zu starken Vereinfachung der Fehlerfortpflanzung. In dem von CANE et al. (1996) vorgeschlagenen Filter wird der Zustandsraum durch Projektion grundlegender Funktionen auf einen linearen Unterraum reduziert. Hierfür werden wenige ausgewählte empirische orthogonale Funktionen (EOF) verwendet.

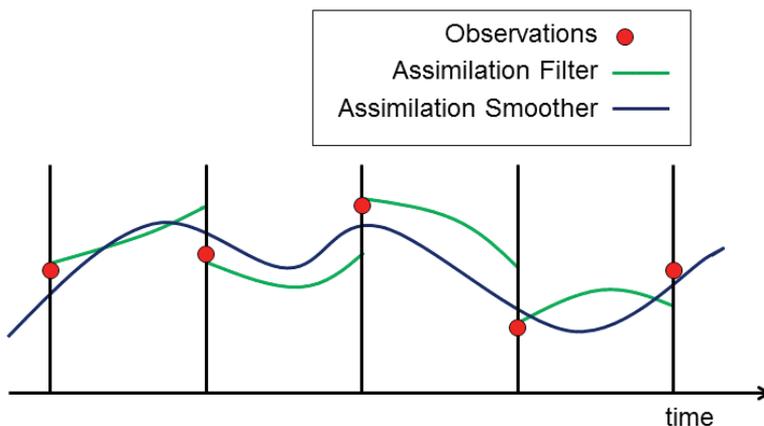


Abbildung 2: Trajektorien des Modellzustands während des Datenassimilationsprozesses in Variationsverfahren (blaue Kurve) und sequenziellen Verfahren (grüne Linien). Die roten Punkte symbolisieren Beobachtungen.

Ein weiterer Ansatz zur Reduktion des Rechenaufwands basiert auf einer niederrangigen Approximation der Zustandskovarianzmatrix. Beispiele für niederrangige Filter sind der Reduced Rank Square Root-Algorithmus (RRSQRT) (VERLAAN und HEEMINK 1995) und der Singular Evolutive Extended Kalman-Filter (SEEK) (PHAM et al. 1998). Im SEEK-Filter wird die Fehlerkovarianzmatrix durch eine singuläre niederrangige Matrix angenähert. In der praktischen Anwendung korrigiert der SEEK-Filter die Vorhersage in die Richtungen, in denen der Fehler durch die Dynamik des Modells nicht ausreichend abgeschwächt wird. Diese „Korrekturrichtungen“ entwickeln sich im Zeitverlauf in Anlehnung an die Entwicklung des Modells. Zur besseren Behandlung der nichtlinearen Fehlerentwicklung wurde der Singular Evolutive Interpolated Kalman-Filter (SEIK) (PHAM et al. 1998) als Variante des SEEK-Filters eingeführt. Er verbindet die niederrangige Approximation mit einer Ensemble-Darstellung der Kovarianzmatrix.

2.3.5 Die dreidimensionale Analyse (3D-VAR)

Die 3D-VAR-Datenassimilation wurde zunächst von SASAKI (1958) entwickelt. Von LORENC et al. (2000) wurde das Schema in der globalen operationellen numerischen Wettervorhersage eingeführt. Jüngere Anwendungen in der Ozeanvorhersage werden von DOBRICIC und PINARDI (2008) beschrieben. Wie auch in dem unter 2.4.2 beschriebenen 4D-VAR-Ansatz wird hier die Berechnung der Gain-Matrix K (Gleichung 4) umgangen. Im Gegensatz zu 4D-VAR werden jedoch alle Beobachtungen (im Zeitfenster um die Analysezeit herum) der Analysezeit zugeordnet. Die Lösung wird durch iterative Auswertungen der Kostenfunktion

$$J(x) = (x - x_k^f)^T B^{-1} (x - x_k^f) + (y_k^o - H[x])^T R^{-1} (y_k^o - H[x]) \quad (8)$$

und ihres Gradienten

$$\nabla J(x) = 2B^{-1}(x - x_k^f) - 2H^T R^{-1}(y_k^o - H[x]) \quad (9)$$

ermittelt. Dieser wird benötigt, um anhand eines geeigneten Algorithmus für den Gradientenabstieg das Minimum zu erreichen. Die Zustandsschätzung x^a zur Minimierung der Kostenfunktion wird dann als Anfangszustand für die nächste Vorhersage verwendet.

2.4 Ansätze mit Smoothern

2.4.1 Allgemeine Darstellung

Wichtige Schemata der optimalen Kontrolltheorie (GHIL und MALANOTTE-RIZZOLI 1991) sind die generalisierten Inversions- und Adjunktenverfahren. Mit diesen als Variationsverfahren bekannten Verfahren wird versucht, die Abweichungen zwischen Daten- und Modelltrajektorien über einen bestimmten Zeitraum zu minimieren. Sie wurden zunächst von MARCHUK (1974) entwickelt und dann von TALAGRAND und COURTIER (1987) sowie MOORE et al. (2011) in der Umweltmodellierung bekannt gemacht.

Variationsmethoden beruhen auf der Annahme, dass die Analyse zum Initialisierungszeitpunkt stattfindet und die einzelnen Beobachtungen an unterschiedlichen Zeitpunkten t_i im betrachteten Zeitintervall auf n Zeitschritte verteilt sind. Analog zur Darstellung der sequenziellen Methoden bezeichnen y_i , x_i und x_{ii} jeweils die Beobachtungen, das Modell und die Wahr-Zustände zur Zeit t_i . Die Fehlerkovarianzmatrix für die Beobachtungsfehler $y_i - H(x_{ii}) - H(x_{ii})$ ist R_i .

2.4.2 Die vierdimensionale Analyse (4D-VAR)

Die 4D-VAR-Analyse minimiert die folgende Kostenfunktion:

$$J(x) = (x - x_b)^T B^{-1} (x - x_b) + \sum_{i=1}^n (y_i - H_i[x_i])^T R_i^{-1} (y_i - H_i[x_i]) \quad (10)$$

Diese Kostenfunktion ist die Summe der quadratischen Abweichungen der Vorhersagefelder und analysierten Felder, gewichtet durch die Genauigkeit der Vorhersage (erster Term

auf der rechten Seite der Gleichung 10), plus der Summe der quadratischen Abweichungen der Analysewerte von den Beobachtungen gewichtet durch die Genauigkeit der Beobachtungen (zweiter Term auf der rechten Seite der Gleichung 10). Sie stellt sicher, dass sich die Analyse nicht zu weit von Beobachtungen und Vorhersagen entfernt. Der entscheidende Vorteil der Variationsansätze liegt darin, dass das Minimierungsproblem der einschränkenden Bedingung unterliegt, dass die Abfolge der Modellzustände x_i eine Lösung der Modellgleichungen sein muss. In der Regel wird der Gradient der Kostenfunktion unter Anwendung eines sogenannten adjungierten Modells geschätzt, das hinsichtlich Implementierung und Pflege des Computercodes sehr anspruchsvoll ist. Darüber hinaus muss die Assimilation in Echtzeitvorhersagen während des gesamten 4D-VAR-Zeitintervalls auf die Verfügbarkeit der Beobachtungsdaten „warten“. In sequenziellen Systemen hingegen sind die Beobachtungsdaten bereit kurz nach ihrer Erhebung nutzbar.

2.4.3 Ensemble Smoother: Optimierung von Randbindungen und meteorologischem Antrieb

Der Algorithmus Ensemble Kalman Smoother (EnKS), eine Abwandlung des EnKF, löst ein Glättungsproblem (VAN LEEUWEN und EVENSEN 1996; EVENSEN und VAN LEEUWEN 2000; VAN LEEUWEN 2001; SAKOV et al. 2010). In die Schätzung des zu einer bestimmten Zeit gegebenen Ozeanzustands fließen auch die Daten ein, die vor und nach diesem Zeitpunkt verfügbar sind. Indem also die zukünftigen Beobachtungsdaten zeitlich in die Vergangenheit propagiert werden, glättet EnKS den dynamischen Zustand und stellt ein längeres Assimilationsfenster sicher. Alle erhobenen Beobachtungen werden in einem einzigen Update assimiliert. Dabei wird die Entwicklung des Zustands und der Zustandsfehlerkovarianz über die gesamte Länge des Zeitfensters berücksichtigt.

BARTH et al. (2010; 2011) zeigten die Verwendung von Ensemble Perturbation Smoothers jeweils für die Optimierung von Tiderandbedingungen und die Korrektur von Bodenwinden. In beiden Fällen wurden vom HF-Radar gemessene Oberflächenströmungen in der Deutschen Bucht assimiliert. Hier stellt sich, wie im vorherigen Kapitel erläutert, die Situation anders dar als im Hochseebereich, da Tiden in Küstenmodellen nicht innerhalb des Gebiets generiert, sondern über die Randbedingungen in das Gebiet hinein propagiert werden. Eine Aktualisierung des Modellzustands mittels Datenassimilation ist daher ohne gleichzeitige Aktualisierung der Randbedingungen nicht ausreichend, um das Modell der Tidevariabilität zu verbessern.

Für den eingesetzten Smoother gilt die Annahme, dass alle Beobachtungen innerhalb des Zeitraums der Modellintegration in einen Beobachtungsvektor (y^o) mit entsprechender Fehlerkovarianz (R) gruppiert werden. Um ein Ensemble dynamisch realistischer Randbedingungen zu erstellen (BARTH et al. 2009), wird eine Kostenfunktion formuliert, die sich direkt auf die Wahrscheinlichkeit der jeweiligen Randbedingungsstörung bezieht. Die Kostenfunktion stellt sicher, dass die Störungen eine finite Energie haben, glatt sind und eine lineare Bedingung erfüllen. Der Ansatz ist eng mit dem asynchronen EnKF (AEnKF, SAKOV et al. 2010) verknüpft, der die Optimierung von Modelltrajektorien (d. h. Modellergebnissen in Raum und Zeit) anstatt von Modellzuständen vorsieht. Für eine zunehmende Zahl von Ensemble-Mitgliedern nähert sich der Ensemble Smoother an den AEnKF an.

3 Datenassimilation im Küstenozean: Anwendungsbeispiele aus der Deutschen Bucht

3.1 Spezifische Probleme der Datenassimilation im Küstenozean

Die Datenassimilation im Küstenozean ist aufgrund der Vielfalt an zu berücksichtigenden Phänomenen und der Vielzahl an interaktiven Skalen in Raum und Zeit wesentlich komplexer (DE MEY et al. 2009; DE MEY und PROCTOR 2009). Realistische Küstenvorhersagen sind daher nur mit einer im Vergleich zum Tiefseebereich deutlich höheren räumlichen und zeitlichen Auflösung möglich. Prozesse wie Tiden und hochfrequente barotrope Reaktionen auf den atmosphärischen Antrieb, die in der Datenassimilation für die offene See gelegentlich vernachlässigt werden, stehen im Küstenozean im Vordergrund. Die kleinen zeitlichen Skalen (Stunden) und horizontalen Skalen (hunderte Meter) stellen sowohl in numerischer als auch in wissenschaftlicher Hinsicht eine Herausforderung dar.

Die meisten der in Kapitel 2 beschriebenen Methoden werden gegenwärtig für die Assimilation von Daten in Küstenmodellen eingesetzt. Ihre Diversität spiegelt die Komplexität der Küstenprozesse und den Stand der Vorhersagesysteme wider, die nach wie vor in der Entwicklung stecken. Einige Anstrengungen werden jedoch unternommen, die Qualität der Datenassimilation in der praktischen Anwendung zu testen und zu verbessern (STANEV et al. 2011).

Nachfolgend werden einige Probleme im Zusammenhang mit der Assimilation von Küstendaten beschrieben.

1. Zusätzlich zu den physikalischen Eigenschaften, die auch für Hochseemodelle zu berücksichtigen sind, sind für Küstenanwendungen die für den Sedimenttransport wichtigen bodennahen Strömungen und eine große Zahl biogeochemischer Eigenschaften als *Messgrößen von Interesse*. Dies führt zu einer wesentlich höheren Zahl von Variablen und einer größeren Komplexität der Modelle und Assimilationsschemata. Kürzere Zeitskalen (z. B. Minuten bis Stunden für Tiden) erhöhen den Bedarf an Beobachtungsdaten hoher Qualität und spezifischen Datenassimilationsschemata.
2. Bei der sequenziellen Datenassimilation kommt es zu *starken Schockeffekten*, wenn Modelle neu gestartet werden (z. B. MALANOTTE-RIZZOLI et al. 1989). Eine allzu häufige Assimilation von Beobachtungsdaten kann sogar zu einer schlechteren Qualität der Modellergebnisse aufgrund der generierten hochfrequenten Bewegungen führen (TALAGRAND 1972). In den nachfolgenden Kapiteln wird ein Ansatz zur Lösung dieses Problems vorgestellt.
3. Im Küstenbereich werden *andere Daten und Beobachtungsplattformen* eingesetzt als in der offenen See. So kann beispielsweise die Satellitenaltimetrie nicht alle für den Küstenozean wichtigen Skalen auflösen. In den Schelfmeeren sind keine Daten aus profilierenden Driftkörpern (Floats) verfügbar. Neue Perspektiven und Herausforderungen bieten hier Daten von Hochfrequenz-Radaren (HF) und ADCP, Wasserstandsdaten von küstennahen Tidepegelstandorten und Bodendruckmessgeräten, Daten zu Wassereigenschaften von festen Messstellen und Fähren (Abb. 3), Glidern und AUVs. Insbesondere muss die Assimilation von Altimetriedaten auch die Unterabtastung des Tidesignals berücksichtigen, die sich mit Hilfe der Synergie zwischen Altimeter-, Tidepegelstation- und HF-Radar-Daten gut kompensieren lässt.

4. Die *komplexe Physik* in der Küstenzone erschwert die Datenassimilation und erfordert die Auflösung des gesamten Spektrums der Phänomene: Veränderungen der Wasserstände (Tiden, Sturmfluten), Skalenvielfalt, mit Gezeiten (z. B. Gezeitenfronten) verbundene Reibungs- und Mischeffekte, Einfluss von kleinskaligen Strukturen des Meeresbodens (z. B. enge Kanäle) und deren zeitliche Änderung durch morphodynamische Prozesse (die wenig bekannt sind), Rolle der Meerengen für den Austausch zwischen den Einzugsgebieten und Zuströme für den Austausch zwischen Wattflächen und offener See, Trockenfallen und Überflutung. Zusätzlich erschwert wird die Situation durch komplexe nicht-lineare Prozesse (z. B. die Entstehung von „Over-Tides“) und andere komplexe Kopplungen unterschiedlicher Prozesse bei unterschiedlichen Frequenzen.

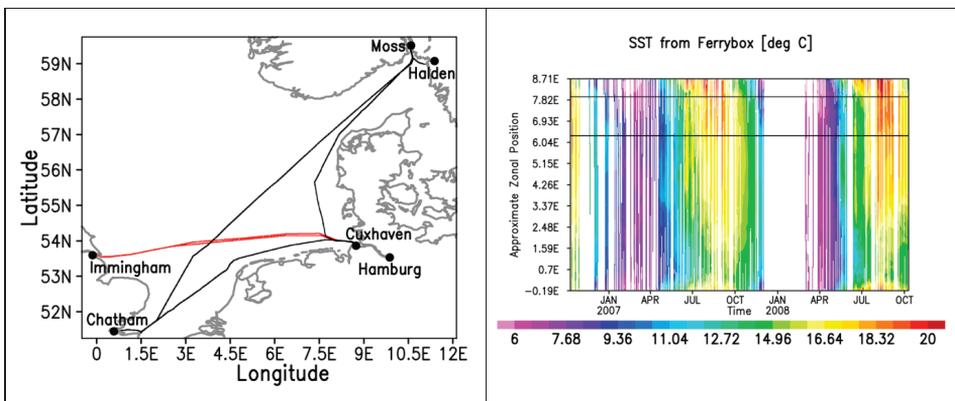


Abbildung 3: FerryBox-Routen in der Nordsee mit rot markierter Route Cuxhaven - Immingham (links) und FerryBox SST-Messungen (rechts) aus den Jahren 2007 und 2008 (aus GRAYEK et al. 2011).

5. Die *Spezifizierung von Fehlern* ist in der Küstenzone extrem schwierig. Aufgrund starker Nichtlinearitäten, die durch die Kopplung unterschiedlicher Prozesse auf unterschiedlichen Zeitskalen entstehen (z. B. Frequenzen von M2-Tiden und Prozesse mit niedrigeren Frequenzen wie die unterschiedliche Schichtung bei Spring- und Nipptiden), sind dynamisch konsistente Fehlervorhersageschemata notwendig. Zudem gehen die meisten Assimilationsschemata von Beobachtungen ohne systematische Fehler mit Gauß-verteilterm Rauschen aus, was sich häufig als unrealistisch erweist. Auch für viele Beobachtungsplattformen im Küstenbereich ist die Ermittlung von Fehlern schwierig. Einige Plattformen, z. B. Satellitenaltimeter, zeigen in der Küstenzone größere Fehler.
6. Die *Kopplung von Modellen aus dem Küsten- und Tiefwasserbereich* ist ein weiteres Problem, das noch nicht hinreichend gelöst werden konnte. Bei den meisten Küstenmodellen erfolgt die Einbettung (Nesting) in eine Richtung. Die Modellauflösung wird in hohem Maße durch den Antrieb von den Rändern gesteuert, deren Daten aus gröberskaligen Modellen stammen. Modelle mit Nesting in beide Richtungen ermöglichen die Propagierung von (assimilierten) Informationen aus Küstenbeobachtungen, die in der Regel von den gröberskaligen Vorhersagesystemen nicht assimiliert werden, aus dem Küstengebiet heraus. Diese Upscaling-Fähigkeit könnte sich für regionale Modelle als vorteilhaft erweisen. Unstrukturierte Gittermodelle bieten eine

effiziente Möglichkeit, einen nahtlosen Übergang zu erzielen, da sie den Übergang zwischen den verschiedenen Skalen im Küsten- und Hochseebereich viel besser darstellen können. In diesen Modellen korrigieren die für das Schelfmeer erhobenen Beobachtungsdaten den Zustand der Tiefsee und die Daten der Tiefsee wiederum den Zustand der Küste. Ein Beispiel für das Potenzial dieser im strukturierten Gittermodell getesteten Möglichkeit kann STANEV et al. (2014) entnommen werden. In den folgenden Kapiteln werden die Vorhersagemodelle durch verfügbare Beobachtungsdaten aus FerryBox-Systemen und HF-Radaren ergänzt. Dabei wird gezeigt, wie sich einige der oben beschriebenen Probleme lösen lassen.

3.2 Assimilation von FerryBox-Daten zu Temperatur und Salzgehalt an der Meeresoberfläche

In diesem Kapitel wird die Assimilation von Messungen des Salzgehalts (SSS) und der Temperatur an der Meeresoberfläche (SST) beschrieben. Die Daten wurden in einem Küstengebiet von einem FerryBox-System erhoben und mittels sequenziellem Filter assimiliert. Eine FerryBox ist ein autonomes System zur Messung, Erfassung und Übertragung von Daten, das bei Fahrbetrieb des Trägerschiffes durchgängig im Einsatz ist (PETERSEN et al. 2006). Die Messung erfolgt in einer Wassertiefe von 4 bis 6 m direkt oder durch Probeentnahme aus einem steten Meerwasserkreislauf. Die für die vorliegende Studie verwendeten einfachen Sensoren messen Temperatur, Salzgehalt, Trübung und Fluoreszenz von Chlorophyll a.

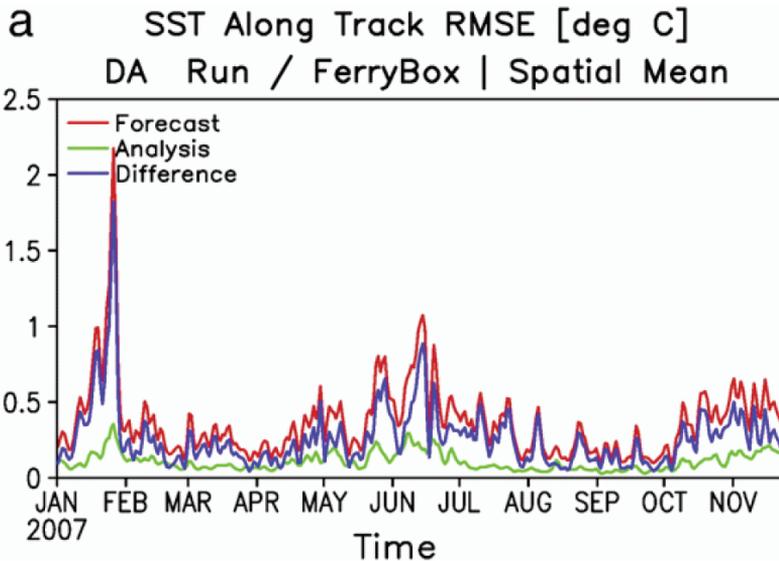


Abbildung 4: RMSE-Werte aus der SST-Vorhersage (rot), SST-Analyse (grün) und jeweilige Differenz (blau) (aus GRAYEK et al. 2011).

Bislang operieren FerryBox-Systeme auf den Nordseestrecken Büsum – Helgoland, Cuxhaven – Harwich, Cuxhaven – Immingham und seit Kurzem zwischen Hamburg, Cuxhaven, Chatham, Moss und Halden (Abb. 3 links). Je nach der zurückzulegenden

Distanz werden die Häfen in den folgenden Intervallen jeweils erneut angefahren: Büsum – Helgoland täglich, Cuxhaven – Immingham unter 36 Stunden, Hamburg – Cuxhaven – Chatham – Moss – Halden etwa 8 Tage. Im vorliegenden Beitrag wird die Strecke zwischen Cuxhaven und Immingham (siehe rote Linie in Abb. 3 links) im Zeitraum von 2007 bis 2008 analysiert.

Zum Einsatz kommt ein auf physikalischen Gleichungen basierendes numerisches 3D-Modell (BURCHARD und BOLDING 2002). Im Modell werden die Gleichungen für die drei Geschwindigkeitskomponenten u , v , w und die Höhe der Meeresoberfläche ζ sowie die Gleichungen für die turbulente kinetische Energie und die Wirbel-Dissipationsrate aufgrund von Viskosität gelöst. Die Anwendung des Modells auf die Deutsche Bucht (Abb. 3) wird in STANEVA et al. (2009) beschrieben.

Das Potenzial von FerryBox-Daten in Bezug auf die Optimierung der Vorhersagegenauigkeit wurde in GRAYEK et al. (2011) analysiert. Wie bereits dargelegt, sind aus der Literatur viele Assimilationsmethoden bekannt, die auf dieses Problem anwendbar sind (z. B. EVENSEN 2003; BRASSEUR 2006; NERGER et al. 2006; DOBRICIC und PINARDI 2008). Da in der vorliegenden Studie weniger die Untersuchung spezifischer Assimilationsmethoden als vielmehr eine allgemeine Analyse der Eignung von FerryBox-Daten für bessere Vorhersagen im Vordergrund steht, entschied man sich für einen relativ einfachen Assimilationsansatz auf Basis der optimalen Interpolation (OI).

Beim Standard-Kalman-Filter muss die Kovarianzmatrix P der Vorhersage in jedem Analyseschritt mit Hilfe von Linearisierungen des Modeloperators oder Ensemble-Verfahren aktualisiert werden. Mit der in dieser Studie verwendeten OI-Methode entfällt dieser komplexe Schritt, da von einer unveränderlichen Vorhersagefehlerstatistik ausgegangen wird. Darüber hinaus sieht das OI-Assimilationsschema eine entfernungsabhängige Ortsbestimmung vor, die langreichweitige Korrelationen in der Background-Kovarianzmatrix P herausfiltert. Zu diesem Zweck wird eine Gaußsche Funktion mit einer Breite von 30 km verwendet.

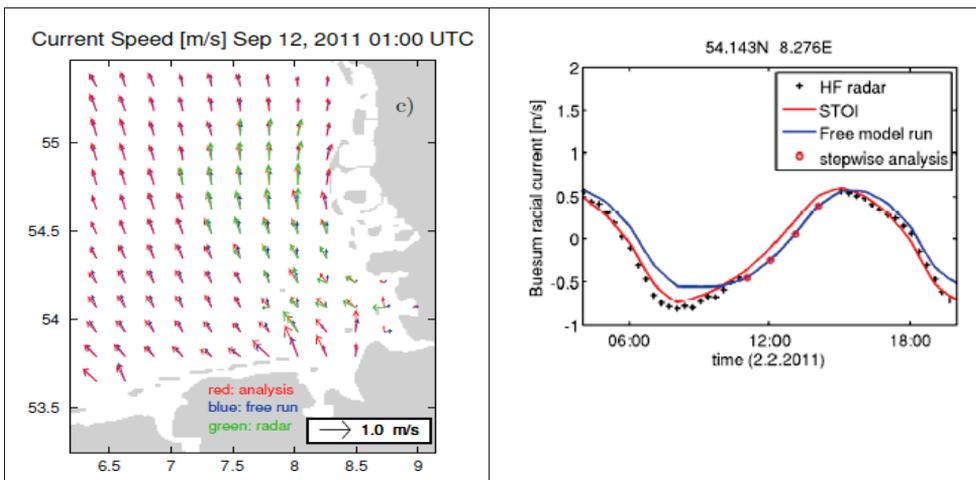


Abbildung 5: (Links) Darstellung der Differenzen zwischen freiem Modelllauf (blau), Analysen (rot) und HF-Radar-Beobachtungen (grün). (Rechts) Messung der radialen Strömungsgeschwindigkeit mit HF-Radar (schwarze Kreuze), freier Modelllauf (blaue Linie) und STOI-Analyse (rote Linie) sowie Analyse mit sequenziellem Ansatz (rote Kreise).

Das auf Basis des OI-Schemas implementierte Assimilationssystem führt täglich um 12:00 Uhr eine Analyse durch. Abb. 4 zeigt einen Vergleich zwischen dem freiem Modelllauf (rot) und der Analyse (grün) in Bezug auf räumlich gemittelte SST RMSE-Fehler. In diesem Fall wurden satellitenbasierte SST-Messungen (OSTIA) als Referenz verwendet. Wie ersichtlich, weist die Analyse meist deutlich weniger Fehler auf.

3.3 OI mit zeitlich/räumlicher Komponente (STOI): ein Schritt in Richtung „beste Schätzung der Oberflächenströmung“

Eine weitere Optimierung des Nutzens von operationellen Beobachtungen wird mit dem COSYNA-System (Coastal Observing SYstem for Northern and Arctic Seas) erzielt, das unlängst im Bereich der Deutschen Bucht installiert wurde. Das System beinhaltet unter anderem drei WERA HF RadarStationen und stationäre Plattformen. Eine besondere Herausforderung bei der HF-Radar-Assimilation ist die Einbindung von Gezeiten. Sie ist insbesondere in Gebieten wie der von Tidenströmungen geprägten Deutschen Bucht ein dringliches Problem. Da HF-Radar-Daten in der Regel mehrmals pro Stunde erhoben werden, empfiehlt es sich nicht, Analyse und Modell bei jeder Aktualisierung des Beobachtungsbestands neu zu starten, da die Modelle in diesem Fall zwischen zwei Zeitschritten der Analyse keinen Gleichgewichtszustand erreichen können. Die STOI-Methode (Spatio Temporal Optimal Interpolation) (STANEV et al. 2014) verbindet Elemente klassischer Assimilationsfilter mit reinen Beobachtungsverfahren (FROLOV et al. 2012; WAHLE und STANEV 2011). Der vorgeschlagene Datenassimilationsansatz (siehe Übersicht der verschiedenen Methoden in Abb. 1) weist Ähnlichkeiten mit den in BARTH et al. (2010) und SAKOV (2010) beschriebenen Methoden auf, hat jedoch den Vorteil, dass die Kovarianzmatrix der Modellfehler einfacher formuliert ist und gleichzeitig eine Vorhersagefähigkeit vorhanden ist.

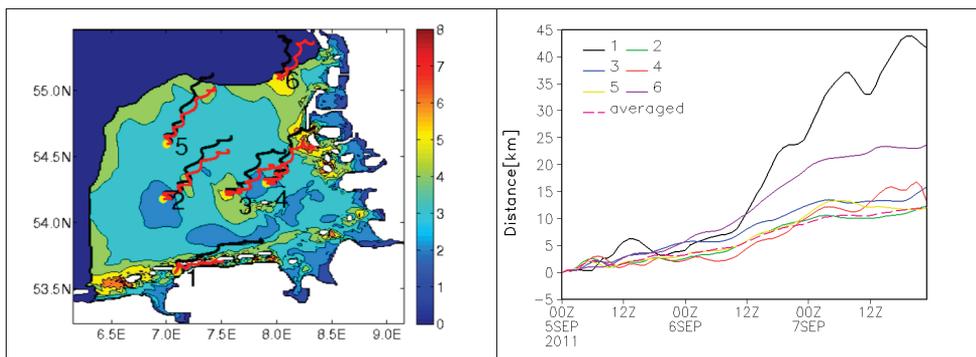


Abbildung 6: (Links) Beobachtungen von COSYNA HF-Radaren sind Grundlage nützlicher Datenprodukte z. B. zum Einsatz in der Seenotrettung. Gezeigt wird die Verdriftung treibender Objekte (in diesem Fall Lagrangescher Partikel). Die schwarzen Linien zeigen die Ergebnisse aus dem freien Modelllauf, die roten Trajektorien die Ergebnisse aus dem Datenassimilationslauf. Die Farbcodierung zeigt die mittlere Entfernung in km zwischen der Position der Lagrangeschen Partikel in der Analyse und im freiem Lauf im September 2011 nach 24-stündiger Integration. (Rechts) Entfernung von Driftpartikeln im Assimilationslauf und im freien Lauf.

Die Oberflächenströmungen werden simultan mit einem Analysefenster von 13 oder 24 Stunden gemessen. Dieser Ansatz ermöglicht eine fortlaufende Trajektorie der

Oberflächenströmung über ein oder zwei Zyklen von M_2 -Tiden. Diese Art der blockweisen Analyse umgeht das Problem der in kurzen Zeitabständen erhobenen HF-Radar-Daten (20-Minuten-Intervalle für das Radarsystem dieser Studie). Die Methode hat gegenüber dem traditionellen Filteransatz auch Vorteile im Hinblick auf Beobachtungsdatenlücken (siehe Abb. 5 rechts). In diesem Fall folgt die sequenzielle Methode dem freien Modelllauf, wenn keine Beobachtungen verfügbar sind, während die STOI-Methode Phasenfehler auch in diesem Zeitraum korrigieren kann. Um den Bereich mit verfügbaren Messungen zu vergrößern und die mit der Verarbeitung von zweidimensionalen Strömungsvektoren aus HF-Radar-Daten verbundenen Probleme zu vermeiden, werden als Eingabe für die Analyse radiale, anstatt zonale und meridionale Komponenten verwendet. Der Hauptunterschied zu Implementierungen mit Ensemble Kalman Smoother (BARTH et al. 2010, BARTH et al. 2011) und dem in SAKOV et al. (2010) beschriebenen Verfahren besteht darin, dass die Schätzung der Modellfehler-Kovarianzmatrix auf Basis der Hintergrundstatistiken und nicht auf Basis von Modelllauf-Ensembles erfolgt.

Die Schätzung einer reduzierten Rangapproximation der Zustandskovarianzmatrix erfolgt durch EOF-Analysen einer Modellsimulationsperiode (Februar bis April 2011). Das Analysefenster zur Vorhersageberechnung wird in Stundenschritten weitergeführt, d. h. es steht jede Stunde eine neue Vorhersage zur Verfügung. Diese Methode unterscheidet sich vom traditionellen Assimilationsansatz, bei dem der Vorhersagehorizont durch einen anhand von analysierten Feldern initialisierten Modellneustart bestimmt wird. Die Methode unterscheidet sich auch von traditionellen statistischen Vorhersageverfahren (z. B. WAHLE und STANEV 2011), die allein auf Messungen basieren. Im STOI-Vorhersagemodus wird der ursprüngliche freie Lauf als Vorabschätzung der Vorhersagen verwendet.

3.4 Potenzieller Nutzen von operationellen Produkten zur Messung von Oberflächenströmungen

STANEV et al. (2014) zeigten mit der Validierung von STOI, dass die HD-Radar-Daten nicht nur interpolierbar, sondern auch räumlich „ausdehnbar“ sind und dadurch homogene abgebildete Datenreihen ermöglichen. Im Gegensatz zu anderen Verfahren, die extrapolierte Oberflächenströmungsfelder allein auf Grundlage von HF-Radar-Daten bereitstellen, sind die Zustandsschätzungen der STOI-Methode mit dem numerischen Modelllauf dynamisch konsistent. Dieser Aspekt ist wichtig hinsichtlich der Nutzung solcher Methoden in operationellen Systemen, deren zentrale Komponente oftmals numerische Modelle sind.

Die folgenden zwei Versuche wurden durchgeführt: Ab dem 1. September 2011, 00:00 Uhr wurden täglich 33.746 Lagrangesche Partikel (die Zahl entspricht der Zahl der nassen Modellpunkte) auf der Oberfläche in der Mitte jeder Gitterzelle freigesetzt und mit einem Lagrangeschen Modell in 2D verfolgt. Auf Basis der stündlich ausgegebenen Ergebnisse der Analysen oder freien Modellläufe wurden Trajektorien für einen Zeitraum von drei Tagen berechnet. Die Trajektorien-simulationen wurden mit denselben Anfangspositionen der Partikel und derselben Integrationszeit von drei Tagen täglich neu gestartet. Die Ausgabe des Lagrangeschen Modells bestand aus 33.746 x 30 x 24 Einzelpositionen. Abb. 6 (links) zeigt die Entfernung zwischen den Partikelpositionen 24 Stunden

nach ihrer Freisetzung in den zwei Läufen im Monatsmittel. Die Positionen der Freisetzung, von denen aus Partikel die Modellgrenze erreichten, wurden von der statistischen Analyse ausgeschlossen.

Diese Karte vermittelt eine Vorstellung von den Erfolgsaussichten einer Seenotrettungsoperation mit und ohne HF-Radar-Daten. Ohne HF-Radar wäre die Ortung eines verschollenen Objekts bereits nach einem Tag um 3 bis 6 km verfälscht. Ein besonders großes Fehlermaß ist bei einer Freisetzung in der Nähe einer vorgelagerten Insel oder nahe des nördlichen Modellrands zu erwarten. Die komplexen mesoskaligen Strömungen um die Insel Helgoland könnten Probleme für Modell und Beobachtungen bereiten und die größere räumliche Variabilität des Fehlermusters erklären. Die Trajektorien aus den beiden Läufen, die ab dem 5. September für die Integrationszeit von drei Tagen erfolgten, wurden an sechs exemplarischen Stellen in die Abbildung integriert. Sie vermitteln eine Vorstellung des dominierenden Ausbreitungsmusters und zeigen, dass die Kohärenz der Tideschwingungen relativ bald nach der Freisetzung verloren geht. Dies belegt den Bedarf an zwischen den Tiden erhobenen Messdaten zur Korrektur der Modelltrajektorien.

Die zeitliche Entwicklung der Entfernung zwischen den an denselben Stellen freigesetzten Partikeln (Abb. 6 rechts) zeigt die schnelle Zunahme der Entfernungen zwischen den Trajektorien in den beiden Läufen. Der als gestrichelte Linie dargestellte gemittelte Ortungsfehler gibt eine generelle Vorstellung von der Ortungsgenauigkeit bei Seenotrettungseinsätzen unter Nutzung der Ausgabedaten aus dem freien Lauf. In drei Tagen lassen sich die Ortungsfehler mit Hilfe der HF-Radar-Daten im Durchschnitt potentiell um ca. 10 km reduzieren. Für Anwendungen in Bereichen wie der Seenotrettung ist dieser Unterschied von Relevanz.

4 Schlussfolgerungen und zukünftige Herausforderungen

Die wirtschaftlichen Vorteile von Vorhersagesystemen im Küstenbereich sind ein überzeugendes Argument für den Ausbau küstennaher Beobachtungssysteme. Marine Operationen hängen in hohem Maße vom Erfolg der Datenassimilationsverfahren ab, da Anwendungen wie die Risikobewertung dynamisch konsistente Daten benötigen, die eng mit verfügbaren Messungen übereinstimmen. In der nahen Zukunft sollen mit Hilfe von OSSEs entwickelte regionale Ozeanvorhersage- und Ozeanüberwachungssysteme installiert werden, wobei die Bereitstellung von zu erwartenden Vorhersagefehlern ein wichtiger Bestandteil sein wird. Auch Multi-Model Ensembles könnten für praktische Anwendungen äußerst nützlich sein.

Die in diesem Beitrag vorgestellten Beispiele zeigen die Anwendung der Datenassimilation am Beispiel deutscher Küstengewässer und verdeutlichen die Anforderungen bei der Entwicklung von Datenassimilationsverfahren für die von Gezeiten geprägten Küstenbereiche. Die vorgestellten Verfahren bieten Lösungen für komplexe physikalische Zusammenhänge und die entsprechenden charakteristischen Zeitskalen, die Nutzung spezifischer Küstendaten (radiale Komponenten von Oberflächenströmungen) aus drei WERA-Stationen sowie einige prä-operationelle Problemstellungen.

Im Bereich der Datenassimilation im Küstenozean verbleiben auch für die Zukunft einige Herausforderungen. Die Diagnosemöglichkeiten und Kennzahlen zur Bewertung der Leistung von Assimilationsmodellen im Küstenbereich müssen weiter verbessert werden. Das Problem der Kopplung von Assimilationssystemen im Küsten- und

Tiefseebereich ist weiterhin nicht auf befriedigende Weise gelöst. Die Vorhersage von biogeochemischen Zustandsgrößen im Küstenozean ist zwar von großer praktischer Bedeutung, steckt jedoch noch in den Kinderschuhen. Der Umgang mit abfließendem Flusswasser, Brackwasser, Sohlrauheit und kleinskaliger Topographie muss weiter verbessert werden. Die Nichthomogenität von Raum und Zeit in der Modellfehlerstatistik muss stärker berücksichtigt werden. Von besonderer Bedeutung ist die optimale Nutzung nicht homogener Daten aus unterschiedlichen Quellen und Plattformen. Hier wird erwartet, dass 4D-VAR und EnKS einen großen Beitrag zur Weiterentwicklung praktischer Anwendungen leisten können.

5 Danksagung

Wir danken Alexander Barth, Sebastian Grayek, Joanna Staneva und Xi Lu für die anregenden Diskussionen und ihre Unterstützung.

6 Schriftenverzeichnis

- BARTH, A.; ALVERA-AZCÁRATEM, A.; BECKERS, J. M.; STANEVA, J.; STANEV, E. V. and SCHULZ-STELLENFLETH, J.: Correcting surface winds by assimilating high-frequency radar surface currents in the German Bight, *Ocean Dyn.*, 61, 599-610, 2011.
- BARTH, A.; ALVERA-AZCÁRATE, A.; BECKERS, J. M.; WEISBERG, R. H.; VANDENBULCKE, L.; LENARTZ, F. and RIXEN, M.: Dynamically Constrained Ensemble Perturbations: Application to Tides on the West Florida Shelf, *Ocean Sci.*, 5, 259-270, 2009.
- BARTH, A.; ALVERA-AZCÁRATE, A.; GURGEL, K.-W.; STANEVA, J.; PORT, A.; BECKERS, J.-M. and STANEV, E.: Ensemble perturbation smoother for optimizing tidal boundary conditions by assimilation of High-Frequency radar surface currents – application to the German Bight, *Ocean Sci.*, 6, 161-178, 2010.
- BRASSEUR, P.: Ocean data assimilation using sequential methods base on the Kalman filter, in: CHASIGNET, E. and VERRON, J. (eds.): *Ocean weather forecasting: An integrated view of oceanography*, Springer, 271-316, 2006.
- BURCHARD, H. and BOLDING, K.: GETM – a General Estuarine Transport Model, No EUR 20253 EN, printed in Italy, European Commission, 2002.
- BURGERS, G.; VAN LEEUWEN, J. and EVENSEN, G.: Analysis scheme in the ensemble Kalman filter, *Mon. Weather Rev.*, 126 (6), 1719-1724, 1998.
- CANE, M. A.; KAPLAN, A.; MILLER, R. N.; TANG, B.; HACKERT, E. C. and BUSALACCHI, A. J.: Mapping tropical Pacific sea level: Data assimilation via a reduced state space Kalman filter, *J. Geophys. Res.*, 101 (C10), 22599-22617, 1996.
- CHASIGNET, E. and Verron, J.: *Ocean Weather Forecasting: An Integrated View of Oceanography*, Springer, Dordrecht, 2006.
- CUMMINGS, J.; BERTINO, L.; BRASSEUR, P.; FUKUMORI, I.; KAMACHI, M.; MARTIN, M.; MOGENSEN, K.; OKE, P.; TESTUT, C.; VERRON, J. and others: Description of assimilation methods used in GODAE systems, *Oceanography Magazine*, 22, 96-109, 2009.
- DALEY, R.: *Atmospheric Data Analysis*, Cambridge University Press, 1991.

- DEE, D. P. and DA SILVA, A. M.: Data assimilation in the presence of forecast bias, Q. J. R. Meteorol. Soc., 124 (545), 269-295, 1998.
- DE MEY, P.; CRAIG, P.; DAVIDSON, F.; EDWARDS, C.; ISHIKAWA, Y.; KINDLE, J.; PROCTOR, R.; Thompson, K.; ZHU, J.; the GODAE COASTAL and S.S.W.G.C. COMMUNITY: Applications in coastal modeling and forecasting, Oceanography, 22 (3), 198-205, 2009.
- DE MEY, P. and PROCTOR, R.: Assessing the value of GODAE products in coastal and shelf seas, Ocean Dyn., 59, 1-2, 2009.
- DOBRICIC, S. and PINARDI, N.: An oceanographic three-dimensional variational data assimilation scheme, Ocean Modelling, 22, 89-105, 2008.
- EVENSEN, G.: The ensemble Kalman filter: theoretical formulation and practical implementation, Ocean Dyn., 31, 961-981, 2003.
- EVENSEN, G.: Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics, J. Geophys. Res., 99, 10, 143-162, 1994.
- EVENSEN, G. and VAN LEEUWEN, P.: An ensemble Kalman smoother for nonlinear dynamics., Mon. Weather Rev., 128, 1852-1867, 2000.
- FROLOV, S.; PADUAN, J.; Cook, M. and Bellingham, J.: Improved statistical prediction of surface currents based on historic HF-radar observations, Ocean Dyn., 62, 1111-1122, 2012.
- GANDIN, L.: Objective Analysis of Meteorological Fields, Translated by Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, 242, 1963.
- GELB, A.: Applied optimal estimation, The MIT press, 1974.
- GHIL, M. and MALANOTTE-RIZZOLI, P.: Data assimilation in meteorology and oceanography, Adv. Geophys, 33, 141-266, 1991.
- GRAYEK, S.; STANEVA, J.; SCHULZ-STELLENFLETH, J.; PETERSEN, W. and STANEV, E.: Use of FerryBox surface temperature and salinity measurements to improve model based state estimates for the German Bight, J. Mar. Syst., 88, 45-59, 2011.
- JAZWINSKI, A. H.: Stochastic Processes and Filtering Theory, Academic Press, New York, 1970.
- KALMAN, R.: A new approach to linear filtering and prediction problems, Journal of basic Engineering, 82 (1), 35-45, 1960.
- LORENC, A.: A global three-dimensional multivariate statistical interpolation scheme, Mon. Weather Rev., 109 (4), 701-721, 1981.
- LORENC, A.; BALLARD, S.; BELL, R.; INGLEBY, N.; ANDREWS, P.; BARKER, D.; BRAY, J.; CLAYTON, A.; DALBY, T.; LI, D. and others: The Met. Office global three-dimensional variational data assimilation scheme, Q. J. R. Meteorol. Soc., 126 (570), 2991-3012, 2000.
- MALANOTTE-RIZZOLI, P., YOUNG, R. E. and HAIDVOGEL, D. B.: Initialization and data assimilation experiments with a primitive equation model, Dyn. Atmos. Oceans, 13 (3), 349-378, 1989.
- MARCHUK, G.: Numerical methods in weather prediction, Academic Press, 1974.
- MOORE, A. M.; ARANGO, H. G.; BROQUET, G.; POWELL, B. S.; WEAVER, A. T. and ZAVALA-GARAY, J.: The Regional Ocean Modeling System (ROMS) 4-dimensional variational data assimilation systems: part I—system overview and formulation, Progress in Oceanography, 91 (1), 34-49, 2011.

- NERGER, L.; DANILOV, S. and HILLER, W.: Using sea-level data to constrain a finite-element primitive-equation ocean model with a local SEIK filter, *Ocean Dyn.*, 56, 634-649, 2006.
- PETERSEN, W.: FerryBox: A mature system for operational monitoring, *Sea Technology*, 47, 53-57, 2006.
- PHAM, D.; VERRON, J. and ROUBAUD, M.: A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography, *J. Mar. Syst.*, 16, 323-340, 1998.
- SAKOV, P.; EVENSEN, G. and BERTINO, L.: Asynchronous data assimilation with the EnKF, *Tellus*, 62A, 24-29, 2010.
- SASAKI, T.: An objective analysis based on the variational analysis, *J. Meteorol. Soc. Japan*, 36, 738-742, 1958.
- STANEV, E.; SCHULZ-STELLENFLETH, J.; STANEVA, J.; GRAYEK, S.; SEEMANN, J. and PETERSEN, W.: Coastal Observing and Forecasting System for the German Bight. Estimates of Hydrophysical States, *Ocean Sci.*, 7, 1-15, 2011.
- STANEV, E.; ZIEMER, F.; SCHULZ-STELLENFLETH, J.; SEEMANN, J.; STANEVA, J. and GURGEL, K.: Blending surface currents from HF radar observations and numerical modelling: Tidal hindcasts and forecasts, Submitted to *J. Atmos. Ocean Techn.*, 2014.
- STANEVA, J.; STANEV, E.; WOLFF, J.-O.; BADEWIEN, T. H.; REUTER, R.; FLEMMING, B.; BARTHOLOMAE, A. and BOLDING, K.: Hydrodynamics and sediment dynamics in the German Bight. A focus on observations and numerical modeling in the East Frisian Wadden Sea, *Cont. Shelf Res.*, 29, 302-319, 2009.
- TALAGRAND, O.: On the Damping of High-Frequency Motions in Four-Dimensional Assimilation of Meteorological Data, *Journal of Atmospheric Sciences*, 29, 1571-1571, 1972.
- VAN LEEUWEN, P.: An Ensemble Smoother with Error Estimates, *Mon. Weather Rev.*, 129, 709-728, 2001.
- VAN LEEUWEN, P. J. and EVENSEN, G.: Data assimilation and inverse methods in terms of a probabilistic formulation, *Monthly Weather Review*, 124, 2898-2913, 1996.
- VERLAAN, M. and HEEMINK, A.: Reduced rank square root filters for large scale data assimilation problems. Second International Symposium on Assimilation of Observations in Meteorology and Oceanography, 1995.
- WAHLE, K. and STANEV, E.: Consistency and Complementarity of Different Coastal Ocean Observations, A Neural Network-based Analysis for the German Bight, *Geophys. Res. Lett.*, 38, 1-4, 2011.