Analyse hydrographischer Schnitte mit Satellitenaltimetrie

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades Doktor der Naturwissenschaften — Dr. rer. nat. —

dem Fachbereich I (Physik/Elektrotechnik) der Universität Bremen vorgelegt von

Martin Losch

September, 2000

Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung

- 1. Gutachter: Prof. Dr. D. Olbers
- 2. Gutachter: PD Dr. R. Schlitzer

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	1	
2	Methode und Modell			
	2.1	Klassische Analyse hydrographischer Schnitte	7	
	2.2	Inverse Methoden zur Analyse hydrographischer Schnitte	8	
	2.3	Adjungierte Methode: Variationsrechnung, Kostenfunktion	9	
	2.4	Statistische Interpretation der adjungierten Methode	12	
	2.5	Ein inverses Modell für die Analyse hydrographischer Schnitte	14	
		2.5.1 Modellgleichungen	15	
		2.5.2 Kostenfunktion	18	
		2.5.3 <i>A priori</i> Fehler	20	
		2.5.4 Diskretisierung	24	
		2.5.5 Minimierungsalgorithmus und Präkonditionierung	25	
		2.5.6 Fehlerrechnung für Systeme mit vielen Unbekannten	26	
3	Obe	rflächenauslenkung aus Satellitenaltimetrie	29	
	3.1	Satellitenaltimetrie	29	
	3.2	Das Geoidproblem	32	
	3.3	Fehlerschätzung für die absolute Oberflächenauslenkung	35	
	3.4	Zusammenfassung	45	
4	Möglichkeiten und Grenzen des Modells			
	4.1	Prinzipielle Möglichkeiten	47	
	4.2	Sensitivitätsstudie	48	
		4.2.1 Datensatz und Versuchsaufbau	48	
		4.2.2 Schätzungen aus <i>in situ</i> hydrographischen Daten	49	
		4.2.3 Zusätzliche <i>a priori</i> Daten/Informationen	57	
		4.2.4 Oberflächenauslenkung	64	
	4.3	Zusammenfassung	66	
5	Test	des inversen Modells an einem synthetischen Datensatz	69	
	5.1	Modellvalidierung/Modelltest	69	
	5.2	Datensatz: $(1/3)^{\circ}$ Nordatlantikmodell	70	

	5.3	Model	Ikonfiguration		72
		5.3.1	Wahl der Parameter und Gewichte		72
		5.3.2	Experimente		78
	5.4	Ergebr	uisse		83
		5.4.1	Experimente mit wenig Glattheit		83
		5.4.2	Experimente mit großer Glattheit der Geschwindigkeit	•	86
	5.5	A poste	eriori Kovarianzen	•	88
	5.6	Diskus	sion	•	92
6	Ana	lyse des	WOCE Schnittes SR3		95
	6.1	Daten			96
		6.1.1	Hydrographie		96
		6.1.2	Mittlere Oberflächenauslenkung	•	99
		6.1.3	Windantrieb und Topographie		102
	6.2	Ergebr	nisse		103
		6.2.1	Analyse der T - S Beziehungen		104
		6.2.2	Vergleich mit dem WOCE SAC Atlas	•	107
		6.2.3	Zirkulation und Transportschätzungen	•	107
		6.2.4	Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten	•	114
7	Zus	ammenf	assung und Ausblick		121
	Nota	ations- u	ınd Abkürzungsverzeichnis		127
	Lite	raturve	rzeichnis		129

Abbildungsverzeichnis

1.1	Logo des "Great Ocean Conveyor Belt" nach Broecker (1991)	2
2.1	Schätzung des "Ozeanrauschens" für den WOCE Schnitt SR3	21
2.2	Schema des Modellgitters	24
2.3	Minimierungsalgorithmus.	26
3.1 3.2	Meereshöhenmessung mit einem Satelliten	30
	kung über dem Geoid.	33
3.3	Schematische Darstellung des Geoidfehlers und voraussichtlicher ku- mulativer Geoidfehler der Missionen GRACE und GOCE im Vergleich	
	mit dem EGM96 Geoidmodell.	34
3.4	Schätzung der mittleren Oberflächenauslenkung im Nordpazifik	36
3.5	Filter von Jekeli (1981)	38
3.6	Ausschnitt des Modellgebiets des (1/3)° Nordatlantikmodells der	
	FLAME Gruppe mit hydrographischem Schnitt.	42
3.7	Spektrum des Abbildungsoperators und singuläre Vektoren	43
3.8	Oberflächenauslenkung entlang des hydrographischen Schnittes	44
4.1	Messpunkte des vollständigen Datensatzes und ausgewählte Messpunkte.	49
4.2	Erste Schätzung des dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeldes vor	
	der Minimierung der Kostenfunktion.	52
4.3	Geschwindigkeitsfelder der Sensitivitätsstudie.	53
4.4	Källén-Lehmann Spektralfunktionen der Hessematrix, des Volumen- und des Temperaturtransports für die Experimente der Sensitivitäts-	
	studie.	55
4.5	Formale Fehler der Normalgeschwindigkeit.	58
4.6	Formale Fehler der horizontalen Tangentialgeschwindigkeitskompo-	
	nente	59
4.7	Formale Fehler der vertikalen Tangentialgeschwindigkeitskomponente.	60
4.8	Vergleich von Salzgehalts- und in situ Temperaturmessungen des WO-	
	CE SAC Atlas mit den Messungen der Expedition AU9407	62
4.9	Skizze zum "Transportparadoxon"	65

5.1	Fourier Leistungsspektrum der Oberflächenauslenkung und der ver-	
	tikal integrierten Volumen- und Temperaturtransporte des FLAME-	
	Modells entlang 24°N.	72
5.2	Vertikalschnitt bei 24°N.	73
5.3	Horizontal gemittelte Amplituden und horizontale Varianz der Nor-	
	malgradienten von Salzgehalt und Temperatur entlang 24°N	74
5.4	A priori Fehlerkovarianzmatrizen der Oberflächenauslenkung.	78
5.5	Källén-Lehmann Spektralfunktionen der Hessematrix und der	
	Volumen- und Temperaturtransporte aus Experiment NOSSHA	80
5.6	Volumen- und Temperaturtransporte	82
5.7	Reduktion der geschätzten Transportfehler durch den Einsatz von	
	Oberflächenauslenkungsdaten.	84
5.8	Horizontale Geschwindigkeiten.	87
5.9	Korrelationen der Transportfehler.	88
5.10	Volumen- und Temperaturtransporte oberhalb und unterhalb von	
	1000 m sowie westlich und östlich von 73° W	91
6.1	Lage des WOCE Schnittes SR3 und der Stationen der Fahrt AU9407	
	mit schematischer Darstellung der allgemeinen Zirkulation	97
6.2	Salzgehalt und Temperatur entlang SR3 im Januar 1994	98
6.3	Erste Schätzung des horizontalen Geschwindigkeitsfeldes	100
6.4	A priori Schätzungen der Oberflächenauslenkung.	101
6.5	Fehlerkovarianzmatrix der geglätteten Oberflächenauslenkung	102
6.6	Rotation der Windschubspannung aus Trenberth <i>et al.</i> (1990)	103
6.7	Auf neutralen Dichteflächen gemittelte Abweichung von Temperatur	
	und Salzgehalt der geschätzten von den gemessenen Feldern.	105
6.8	θ -S-Diagramm der entlang Flächen konstanter neutraler Dichte gemit-	
	telter Profile von potentieller Temperatur und Salzgehalt.	106
6.9	Verteilungen von potentieller Temperatur und Salzgehalt der Experi-	
	mente ohne Oberflächenauslenkungsdaten.	108
6.10	Normalkomponente v der Geschwindigkeit entlang SR3	109
6.11	Komponenten der tangentialen Geschwindigkeit entlang SR3 für Ex-	
	periment NOSSH	113
6.12	Anpassung der langwelligen Oberflächenauslenkung an die Daten.	115
6.13	Potentielle Dichte relativ zur Oberfläche.	116
6.14	Temperatur- und Salzgehaltsunterschiede zwischen Experimenten mit	
	und ohne Oberflächenauslenkungsdaten.	118

Tabellenverzeichnis

4.1	Kurzbeschreibung der Experimente dieses Kapitels	50
4.2	Übersicht über die verwendeten Kostenfunktionen	51
5.1	Übersicht über alle Experimente dieses Kapitels.	79
5.2	Vergleich der Volumen- und Temperaturtransporte	81
6.1	Wassermassenklassifizierung durch neutrale Dichte	96
6.2	Zusammenfassung der Experimente mit dem WOCE SR3 Schnitt	104
6.3	Volumen- und Temperaturtransport durch SR3	110

Frustra fit per plura quod potest fieri per pauciora.

Wilhelm von Ockham (1288–1349?)

Kapitel 1

Einleitung

Die Wassermassen des Weltozeans sind in ständiger Bewegung. Die Bandbreite dieser Bewegung reicht von starken, dauerhaft vorhandenen Strömungen wie dem Golfstrom bis hin zu kleinen, kurzlebigen Wirbeln. Durch Reibung an der Grenzschicht zwischen Meeresoberfläche und Atmosphäre treibt der Wind die Oberflächenströmungen an. Dichtevariationen an der Oberfläche durch Erwärmung oder Abkühlung, Entzug von Süßwasser durch Verdunstung oder Gefrieren und Aussüßung durch Niederschlag oder Eisschmelze verändern die Stabilität der vertikalen Schichtung des Ozeans und werden so zur Ursache für vertikale Bewegungen. Die Dichtevariationen führen in der Tiefe zu horizontalen Druckgradienten, die die thermohaline Zirkulation im Ozean antreiben. Diese beiden Systeme der Oberflächen- und Tiefenzirkulation werden durch die Metapher des großen Förderbandes ("great ocean conveyor belt", Broecker, 1987, 1991, siehe Abb. 1.1) verbunden. Dieses Konzept verdeutlicht die Reise der Wassermassen von ihren Entstehungsgebieten im Nordatlantik und dem antarktischen Weddellmeer durch den Atlantik, mit dem antarktischen Zirkumpolarstrom in den Indischen und Pazifischen Ozean, wo sie nach Vermischung mit leichteren Wassermassen entlang dieses Weges an die Oberfläche gelangen. Dieses Bild der großräumigen zeitunabhängigen Zirkulation gilt als schematisches Modell der Wassermassenausbreitung. Verschiedene Einzelheiten der Zirkulation sind jedoch nicht vollständig geklärt. Rintoul (1991) warf zum Beispiel die Frage nach der Herkunft des Oberflächenwassers im Atlantik auf. Kommt es als warmes indisches Wasser über den Agulhas Strom in den Atlantik oder als kälteres Pazifikwasser durch die Drake Passage? Fragen wie diese haben eine Bedeutung für den Wärmetransport im Ozean. Dieser Transport hat eine vergleichbare Größenordnung wie der atmosphärische Wärmetransport und spielt eine wichtige Rolle bei Fragestellungen, die das Erdklima betreffen.

Die Relevanz dieser Fragen erklärt das starke Interesse, mit dem die Transportvorgänge und Umwälzbewegungen im Ozean untersucht werden. Dabei werden zwei Wege verfolgt:

 Modelle, die alle auf physikalischen Prinzipien wie Massen-, Energie- und Impulserhaltung basieren, sollen die Ozeanzirkulation reproduzieren und verstehen helfen. Dieses Verständnis ermöglicht dann Vorhersagen über den Ozean-



Abb. 1.1: Logo des "Great Ocean Conveyor Belt" nach Broecker (1991). (Illustration von Joe Le Monnier, Natural History Magazine.)

zustand. Neben den analytischen Modellen (siehe z.B. Pedlosky, 1996) haben sich eine Vielzahl von numerischen Modellen bewährt (siehe z.B. Haidvogel und Beckmann, 1999). Das Spektrum dieser Modelle reicht von globalen Zirkulationsmodellen über regionale Modelle bis hin zu Konzeptmodellen für Prozessstudien.

2. Auf der anderen Seite befindet sich die "messende Zunft". Durch umfangreiche und teure Messkampagnen werden möglichst viele hydrographische Parameter wie Salzgehalt und Temperatur, passive Spurenstoffe wie Sauerstoff, Phosphat, Silikat, Nitrat und transiente Spurenstoffe wie Radionukleide und Fluorchlorkohlenwasserstoffe erfasst. Zusammen mit Messungen der Geschwindigkeit an Verankerungen oder mit schiffsgestütztem ADCP (Acoustic Doppler Current Profiler) versucht man, die Verteilung und Ausbreitung von Wassermassen zu beschreiben und zu verstehen.

Die Möglichkeiten beider Methoden unterliegen Einschränkungen, die auf ihre Natur zurückzuführen sind. Endliche Modellauflösung, beschränkte verfügbare Computerresourcen, Parametrisierung unverstandener und nicht auflösbarer physikalischer Prozesse auf der einen Seite und teure Schiffszeiten, geringe Dichte des Messnetzes, schlechte zeitliche Auflösung, nicht zuletzt widrige Witterung auf der anderen Seite behindern, wenn nicht gar verhindern, den Erfolg der Bemühungen. Deshalb streben immer mehr Vertreter der beiden Richtungen der Ozeanographie an, Fortschritt durch die Synthese der Erkenntnisse aus beiden Herangehensweisen zu erreichen. Diese Synthese kann man in zwei formal ähnliche Bereiche aufteilen:

1. Datenassimilation

Als Assimilation wird häufig die Korrektur der bestehenden numerischen Zirkulationsmodelle durch Daten bezeichnet. Dabei werden die Parameter der zeitabhängigen Modelle systematisch verändert, so dass die modellierten Felder in einem optimalen Sinn mit den Messungen übereinstimmen. Meist wird die Abweichung zwischen Modell und Daten durch eine Norm definiert, der sogenannten Kosten-, Ziel- oder Objektfunktion. Durch die Anpassung an im Allgemeinen wenige Daten erhofft man sich auch eine bessere Reproduktion der nicht gemessenen oder nicht messbaren Parameter, so dass man nach erfolgreicher Assimilation ein genaueres Bild der Ozeanzirkulation erhält. Als jüngere Beispiele sei auf das DIADEM Projekt (Brankart *et al.*, 1999), das Buch von Malanotte-Rizzoli (1996), das MERCATOR Projekt (http://mercator.cls.fr) und die Arbeiten von Fukumori (1995), Stammer *et al.* (1997), Bell *et al.* (2000) und Wenzel *et al.* (2000) verwiesen.

2. Datenanalyse

Die Analyse in dem hier gemeinten Sinn beruht auf ähnlichen mathematischen Prinzipien wie die Datenassimilation. Daten der messbaren Größen und Modellvorstellungen werden in einem optimalen Sinn, definiert durch eine Norm der Abweichungen, aneinander angepasst. Im Unterschied zur Assimilation ist hier das Modell im Allgemeinen zeitunabhängig und auch bei weitem nicht so komplex wie beispielsweise ein Modell der allgemeinen Zirkulation. Ziel der Analyse ist es, mit Hilfe von einfachen dynamischen Prinzipien eine objektive Schätzung der schlecht bis gar nicht beobachtbaren Größen aus gut messbaren Eigenschaften des Ozeans zu erhalten. Weit verbreitet ist die Behandlung der sogenannten dynamischen Methode der Ozeanographie mit inversen Methoden, um aus hydrographischen Daten Volumentransporte zu schätzen (z.B. Wunsch, 1978; Nechaev und Yaremchuk, 1995, siehe auch Kapitel 2).

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Analyse von hydrographischen Daten, wie sie bei schiffsgestützten Messkampagnen erhoben werden. Damit gehört diese Arbeit inhaltlich zu dem zweiten Typus der Synthese von Modellierung und Messung. Zusätzlich zu den hydrographischen Daten kommen in dieser Untersuchung Beobachtungen der Oberflächenauslenkung des Ozeans durch Satelliten zum Einsatz.

Über die letzten zwei Jahrzehnte hinweg hat sich die Satellitenfernerkundung und insbesondere die Satellitenaltimetrie zu einem wertvollen Beobachtungssystem entwickelt. Die globale Überdeckung der satellitengestützten Messungen bei hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung eröffnet viele neue Möglichkeiten für die Beobachtung des Ozeans. Gleichzeitig bleiben diese Möglichkeiten jedoch auf die Ozeanoberfläche beschränkt. Dabei erweist sich die Oberflächenauslenkung als einzige vom Satelliten aus messbare physikalische Eigenschaft, die die dreidimensionale, großskalige Zirkulation widerspiegelt (Wunsch und Stammer, 1998).

Die Oberflächenneigung ist bei großräumigen, langsamen Strömungen, die sich durch ein Gleichgewicht von Druckgradient- und Corioliskraft auszeichnen, proportional zur Oberflächengeschwindigkeit. Mit Hilfe dieser einfachen Beziehung zwischen Auslenkung und Strömung konnten viele Erkenntnisse über den Ozean und seine Variabilität gewonnen werden. Fu und Cheney (1995) und Wunsch und Stammer (1998) bieten hierzu Übersichten. Es gibt jedoch nur wenige Versuche, die absolute Strömung aus Messungen der Oberflächenauslenkung zu bestimmen (z.B. Vogeler und Schröter, 1999). Die Hauptursache hierfür ist das Fehlen einer genauen Bezugsfläche. Bisherige Schätzungen dieser Fläche, des Geoids, enthalten zu große Fehler, so dass die Oberflächenauslenkung selbst Ungenauigkeiten aufweist, die die Größenordnung des Signals erreichen. Neue Geoidmodelle versprechen hier Abhilfe.

Steht eine hochauflösende globale Vermessung der Meerestopographie zur Verfügung, ergibt sich für die Ozeanographie eine prinzipielle Frage:

Was kann die Messung der Oberflächenauslenkung zum Verständnis der Ozeanzirkulation beitragen?

Um diese Frage umfassend beantworten zu können, sind eine Reihe von Untersuchungen mit verschiedenen Modellen notwendig, die jeweils zur Bearbeitung unterschiedlicher Fragestellungen der Ozeanographie entwickelt wurden. In diesem Zusammenhang beschäftigt sich die vorliegende Arbeit mit dem Einfluss der Satellitenmessung der Meeresoberflächentopographie auf die Analyse hydrographischer Daten entlang eines sogenannten Schnittes durch den Ozean. Die Analyse geschieht mit einem nichtlinearen und zeitunabhängigen geostrophischen Modell, das aus hydrographischen Messungen das Geschwindigkeitsfeld entlang des Schnittes schätzt. Im Unterschied zu früheren Arbeiten von Wunsch und Gaposchkin (1980) und Ganachaud et al. (1997) werden hier nur Daten eines einzelnen Schnittes betrachtet. Dadurch besteht die Möglichkeit, ein zeitunabhängiges Modell zu formulieren, dessen systematische Fehler, die durch die Annahme synoptischer (gleichzeitiger) Messungen entstehen, gegenüber klassischen Boxmodellen reduziert sind. Des Weiteren wird das Modell direkt an die Messungen der absoluten Oberflächenauslenkung und nicht ihrer Neigung, d.h. an ihren horizontalen Gradienten angepasst, wodurch eine explizite Beschreibung der Fehler dieser abgeleiteten Größe vermieden werden kann. Als zusätzlicher Vorteil des hier verwendeten Modells muss eine Erweiterung des Raumes der unabhängigen Variablen um die hydrographischen Parameter Temperatur und Salzgehalt betrachtet werden, die eine Anpassung des Dichtefeldes an die verschiedenen Messungen ermöglicht. Auf diese Weise kann kurzskaliges, ageostrophisches Rauschen der Messwerte unterdrückt werden. Wegen der kleineren a priori Modellfehler wird es möglich sein, den Einfluss hochauflösender Geoidmodelle auf die Analyse hydrographischer Schnitte besser zu beurteilen.

Im Anschluss an eine allgemeine Beschreibung der Analyse von hydrographischen Schnitten werden in Kapitel 2 inverse Techniken, insbesondere die adjungierte Methode, besprochen. Danach wird das geostrophische Modell vorgestellt und weiterentwickelt. Dieses Modell ist die Grundlage der Untersuchungen dieser Arbeit. Kapitel 3 gibt einen Überblick über die Messung der Meeresoberfläche durch Satellitenaltimetrie und über die damit verbundenen Probleme. In Kapitel 4 wird anhand eines kleinen Datensatzes geprüft, ob die Modellannahmen und die zur Verfügung stehenden Daten ausreichen, um sinnvolle Schätzungen des Geschwindigkeitsfeldes und der Transporte zu erhalten. Kapitel 5 beschäftigt sich mit den Fragen, welchen Einfluss verbesserte Geoidmodelle auf die Transportschätzungen des Modells haben und wie gut die Modellschätzungen einen mittleren Zustand repräsentieren. Dazu wird ein synthetischer Datensatz herangezogen, der sowohl Mess- als auch Vergleichsgrößen enthält. Eine Anwendung erfährt das Modell schließlich in Kapitel 6. Dort wird der hydrographische WOCE Schnitt SR3 analysiert und mit Meerestopographiedaten und einem aktuellen Geoidmodell kombiniert. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse mit kritischem Ausblick findet sich am Schluss der Arbeit in Kapitel 7.

Kapitel 2

Methode und Modell

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der hier verwendeten Modellstrategie und stellt sie in Zusammenhang mit anderen Modellen und Methoden.

Die Analyse hydrographischer Schnitte nimmt in der Auswertung ozeanographischer Daten eine zentrale Stellung ein. Während die Messungen der lokalen Temperatur- und Salzgehaltsverteilung sowie der Konzentration passiver Spurenstoffe immer genauer werden, stellt die direkte Bestimmung der absoluten Geschwindigkeiten im Ozean nach wie vor hohe logistische Anforderungen. Ein indirekter Weg, das absolute Geschwindigkeitsfeld durch einen Schnitt zu erhalten, ist die klassische "dynamische Methode" (Abschnitt 2.1). Der subjektive Charakter dieser Methode lässt den Wunsch nach Eindeutigkeit der Lösung ebenso offen wie das Bedürfnis unbefriedigt, die Gültigkeit der Ergebnisse objektiv beurteilen zu können. Aus diesen Gründen zog Wunsch (1978) inverse Methoden zur Analyse hydrographischer Schnitte heran (Abschnitt 2.2). In den nachfolgenden Jahren konnten diese Methoden erfolgreich eingesetzt und immer weiter verfeinert werden (siehe Wunsch, 1996, für eine Übersicht). Einen anderen Ansatz stellten Nechaev und Yaremchuk (1995) vor. Die vorliegende Arbeit baut auf dem Modell dieser Autoren auf.

Nach einem kurzen Überblick über die vorhandenen Methoden zur Analyse hydrographischer Schnitte beschreiben die übrigen Abschnitte dieses Kapitels die Einzelheiten des Modells und seiner Weiterentwicklungen.

2.1 Klassische Analyse hydrographischer Schnitte

Aus einer konsequenten Skalierung der vollständigen Bewegungsgleichungen kann abgeleitet werden, dass bei Bewegungen im Ozean mit Perioden von mehr als einem Tag und räumlichen Skalen von über 10 km, die sich nicht in unmittelbarer Nähe der Meeresoberfläche oder des Äquators befinden, die Corioliskraft und der horizontale Druckgradient die horizontale Impulsbalance dominieren (Pedlosky, 1987). Damit befinden sich weite Teile des Weltozeans im sogenannten geostrophischen Gleichgewicht. Die vertikale Impulsgleichung wird dabei mit der gleichen Approximationsordnung durch die hydrostatische Balance genähert. Unter der Voraussetzung großräumiger und langsamer Bewegung können bei der "dynamischen Methode" aus dem vertikalen Dichteprofil zweier ozeanographischer Messstationen mit Hilfe der geostrophischen Relationen die Unterschiede der Strömungsgeschwindigkeit zwischen zwei isobaren Flächen ermittelt werden (Dietrich *et al.*, 1975).

Seit der Einführung der dynamischen Methode war man bemüht, die so ermittelten Relativwerte der Geschwindigkeit in Absolutwerte zu überführen. Das geschah auf verschiedenen Wegen. Einer bestand darin, die berechneten relativen Geschwindigkeiten an Messungen der absoluten Bewegung in einer Tiefe anzuschließen. Dies misslingt jedoch im offenen Ozean, wo periodische Gezeitenströme, interne Wellen und andere, kurzfristige Störungen die Ermittlung der schwachen stationären Strömung aus kurzen Messreihen erschweren. Andere Methoden machten sich die Erfahrung zu Nutze, dass die Strömung in der Tiefe sehr schwach ist, und setzten voraus, dass die Bewegung in großen Tiefen ganz verschwindet (Wüst, 1935; Defant, 1941). Der Gebrauch einer tiefen "Nullschicht" oder "level of no motion" führt sicherlich nur zu kleinen Fehlern in den oberflächennahen Schichten, jedoch ist die Tiefsee keineswegs bewegungslos (Dietrich et al., 1975). Mit zunehmender Datenmenge wurden zusätzlich Versuche unternommen, nicht nur das Geschwindigkeitsfeld, sondern auch die Nettotransporte von Masse, Salz, Wärme usw. zu schätzen. Kleine vertikale Verschiebungen des bewegungslosen Horizonts führen dabei zu großen Veränderungen dieser Flüsse. Worthington (1976) führte in diesem Zusammenhang die dynamische Methode ad absurdum, indem er bei seinem Versuch, auch die Bewegungen unterhalb der Nullschicht zu erfassen, die Annahme des geostrophischen Gleichgewichts teilweise verwarf.

Einen gänzlich anderen Weg verfolgte Hidaka (1940a,b), als er die dynamische Methode mit Erhaltungsgleichungen für Masse und Salz in einem Boxmodell kombinierte. Dieser Versuch scheiterte, weil Hidaka kein Werkzeug zur Verfügung stand, das die korrekte Behandlung mathematisch schlecht gestellter Probleme erlaubte. Die Lösung solcher Probleme ist durch den Einsatz inverser Methoden möglich.

2.2 Inverse Methoden zur Analyse hydrographischer Schnitte

Hidakas Konzept für ein Boxmodell wurde von Wunsch (1978) wieder aufgegriffen. Hydrographische Schnitte und der natürliche Küstenverlauf schließen eine Region in einer "Box" ein. Innerhalb dieser Box werden Masse, Salz, Wärme und andere chemische Eigenschaften wie beispielsweise Silikatkonzentrationen in bestimmten Schichten erhalten. Diese Schichten sind sinnvollerweise so festgelegt, dass sie die vertikale Dichtestruktur des Ozeans widerspiegeln. Die vertikale Scherung des Geschwindigkeitsfeldes zwischen den Temperatur- und Salzgehaltsprofilen zweier ozeanographischer Messstationen erhält man mit Hilfe der dynamischen Methode aus der über Temperatur und Salzgehalt gemessenen Dichteverteilung ("Thermischer Wind"). Die einzige Unbekannte in den Erhaltungsgleichungen für Masse, Salz, Wärme usw. ist dann eine zu den relativen Geschwindigkeiten additive Größe pro Stationspaar. Diese "Referenzgeschwindigkeiten" repräsentieren die absoluten Geschwindigkeiten in dazugehörigen Referenztiefen, die durch die Wahl der Nullschicht festgelegt werden. Im Allgemeinen kann man nicht genügend Erhaltungsgleichungen aufschreiben, um für die Referenzgeschwindigkeiten eine eindeutige Lösung zu finden. Stattdessen muss man ein unterbestimmtes Problem lösen.

Zunächst verwendete Wunsch eine Singulärwertzerlegung ("Singular Value Decomposition" oder SVD, siehe z.B. Lanczos, 1961) der Koeffizientenmatrix des oben beschriebenen Gleichungssystems. Bei M Gleichungen und N Unbekannten (M < N) hat diese Matrix $K \leq M$ Singulärwerte. Die allgemeine Lösung des Gleichungssystems setzt sich aus K Singulärvektoren (partikuläre Lösung) und N - K Nullraumvektoren zusammen. Da der Nullraum zu den Singulärvektoren orthogonal ist, ergibt sich hier eine gute Möglichkeit, Strategien für Beobachtungen von Eigenschaften zu entwickeln, die Modell und bisherige Messungen noch nicht beschreiben können. Es hat sich jedoch das Prinzip von "Ockhams Rasiermesser" durchgesetzt, wonach bei verschiedenen Erklärungen für ein Phänomen die einfachste gewöhnlich die beste ist. In diesem Fall erscheint die partikuläre Lösung ohne Beiträge des Nullraums als die einfachste. Gleichzeitig hat sie die kleinste Norm des Lösungvektors (Wunsch, 1996).

Dieses Vorgehen entwickelte sich bald zu einer Standardmethode für die Analyse hydrographischer Schnitte. Beispielsweise untersuchte Roemmich (1981) die Zirkulationsmuster der Karibik, Wunsch (1984) kombinierte verschiedene Datentypen und Annahmen, um die atlantische Zirkulation und insbesondere die dortigen Wärmeflüsse zu schätzen, und Rintoul (1991) berechnete den Austausch von Wärme und Wassermassen zwischen dem Südatlantik und den angrenzenden Ozeanbecken. Zum ersten Mal verwendete Macdonald (1998) ein globales Boxmodell zur Schätzung von Massen-, Temperatur- und Süßwasserflüssen im Ozean. McIntosh und Rintoul (1997) zeigten, dass dort, wo Flüsse senkrecht zu Dichteflächen nicht vernachlässigbar sind, diese als Unbekannte in das Boxmodell aufgenommen werden müssen, um gute Lösungen für die Referenzgeschwindigkeiten zu erhalten. Sloyan (1997) konnte mit dem Verfahren Mischungsraten von Wassermassen im südlichen Ozean abschätzen.

2.3 Adjungierte Methode: Variationsrechnung, Kostenfunktion

Das Boxmodell von Macdonald (1998) beruhte nicht auf einer Singulärwertzerlegung der Koeffizientenmatrix eines Gleichungssystems. Stattdessen hob die Autorin die Unterbestimmung auf, indem sie zusätzliche Informationen in Form von *a priori* Schätzungen über die unbekannten Referenzgeschwindigkeiten heranzog. Eine möglichst allgemeine Beschreibung dieses Vorgehens greift auf die Methoden der Variationsrechnung zurück. Das Kernstück des Verfahrens besteht darin, eine Kostenfunktion zu minimieren, die eine Norm der Residuen zwischen Modell und Daten ist. Die Kostenfunktion nimmt häufig eine quadratische Form in den Residuen an. Dann wird die Methode auch als Methode der kleinsten Quadrate ("least-square method") bezeichnet. Die Minimierung der Kostenfunktion wird durch Variation der Modellvariablen erreicht. Vom mathematischen Standpunkt aus betrachtet ist ein numerisches Modell ein Operator, der die unabhängigen Modellvariablen in den Datenraum abbildet. Der dazu adjungierte Operator, eigentlich der adjungierte Operator des um einen lokalen Punkt linearisierten Modelloperators, wiederum bildet die Daten-Modell Residuen auf den Gradienten der Kostenfunktion ab. Deshalb wird diese Methode häufig auch die adjungierte Methode genannt. Sie wird in der Literatur umfassend behandelt (siehe z.B. Sasaki, 1970; Le Dimet und Talagrand, 1986; Thacker, 1988b, uva.). An dieser Stelle sollen nur diejenigen Aspekte betrachtet werden, die hier unmittelbar von Bedeutung sind. Messungen und Modellvariablen werden im Folgenden als normalverteilt angenommen.

Kostenfunktion

Die Messung einer normalverteilten Variablen weicht um einen Fehler von dem wahren Wert ab. Gesucht wird nach diesem wahren Wert der Variable, dessen Schätzung durch das Modell geschieht. Falls zwei Messungen miteinander korrelieren, werden ihre Fehler durch eine Fehlerkovarianzmatrix beschrieben. Diese Matrix beschreibt die relative Genauigkeit der Messungen. Die beste Anpassung des Modells kann dann als diejenige Lösung des Modells definiert werden, welche die mit der Inversen der Fehlerkovarianzmatrix gewichtete Summe der Fehlerquadrate (Daten-Modell Residuen) minimiert:

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2} \langle d - m | W | d - m \rangle \stackrel{!}{=} \min.$$
(2.1)

Hier ist $|m - d\rangle$ der (Spalten-)Vektor der Differenzen zwischen dem Vektor der Datenwerte $|d\rangle$ und dem Vektor der Schätzwerte durch das Modell $|m\rangle$. Zeilenvektoren werden durch $\langle |$ gekennzeichnet. In dieser Schreibweise bekommt das innere Produkt zwischen $|x\rangle$ und $|y\rangle$ die Form $\langle x|y\rangle$. Das Gewicht der Differenzen ist durch die Inverse W der Kovarianzmatrix gegeben. Die notwendige Bedingung für ein Minimum dieser Kostenfunktion \mathcal{J} ist das Verschwinden ihres Gradienten relativ zu dem Vektor der Modellvariablen x:

$$\delta \mathcal{J} = \langle \delta x | \nabla \mathcal{J} \rangle = \langle m' \, \delta x | W | m - d \rangle = 0, \tag{2.2}$$

mit der Jakobimatrix $(m')_{ij} = \partial m_i / \partial x_j$. Gleichzeitig müssen die Variablen x die Modellgleichungen

$$|E(x)\rangle = 0 \tag{2.3}$$

erfüllen, die hier ebenfalls als Vektor geschrieben sind. Diese zusätzliche Bedingung teilt die Variablen x in unabhängige p und abhängige q Größen. Dabei kann man häufig keine explizite Beziehung zwischen p und q, der Form $\tilde{E}|p\rangle - |q\rangle = 0$, angeben.

Wenn die Schätzwerte m nichtlineare Funktionen der Variablen x sind, dann ist (2.2) nicht hinreichend. In diesem Fall sollte aber bei einem iterativen Verfahren die Wahl einer ersten Schätzung nahe genug am Minimum der Kostenfunktion die Konvergenz im Minimum sicherstellen (Thacker, 1989).

Variation der Lagrangefunktion

Das Extremwertproblem (2.1) mit den Nebenbedingungen (2.3) kann gelöst werden, indem man jede Gleichung mit einem unbekannten Lagrange-Multiplikator λ multipliziert und die Lagrange-Funktion bildet.

$$\mathcal{L}[x,\lambda] = \mathcal{J} + \langle \lambda | E \rangle \tag{2.4}$$

Die Bestimmung stationärer Punkte von (2.4) ist gleichbedeutend mit der Extremwertaufgabe (2.1) mit den Nebenbedingungen (2.3) (siehe, z.B. Bertsekas, 1982). Die Variation von \mathcal{L} nach λ führt wieder zu den Modellgleichungen (2.3), während die Variation nach x Gleichungen für den Gradienten der Kostenfunktion liefert.

$$\delta \mathcal{L} = \langle \delta x | (|\nabla \mathcal{J} \rangle + |(E')^T \lambda \rangle) + \langle \delta \lambda | E \rangle = 0.$$
(2.5)

Für (2.5) findet man häufig die Bezeichnung "adjungierte Modellgleichungen". Zusammen mit den Modellgleichungen (2.3) bilden sie die Euler-Lagrange Gleichungen des Problems. In diesem Zusammenhang werden die Lagrange-Multiplikatoren auch adjungierte Variablen genannt. Man kann sie durch Elimination der abhängigen Variablen in den Modellgleichungen als Funktion der unabhängigen Variablen bestimmen. So erhält man einen Ausdruck für den Gradienten der Kostenfunktion relativ zu den unabhängigen Variablen. Die Bedingung, dass dieser Gradient verschwindet, führt dann schließlich zu unabhängigen Variablen, die das ursprüngliche Problem lösen. Allerdings sind die Euler-Lagrange Gleichungen nur von theoretischem Interesse, weil ihre direkte Lösung nur in speziellen Fällen möglich ist (Le Dimet und Talagrand, 1986).

"Weiche" Nebenbedingungen

Vorstellbar ist auch eine Situation, in der die Modellgleichungen (2.3) nicht als, nach Sasaki (1970), "harte" Nebenbedingungen exakt erfüllt sein müssen. Als "weiche" Nebenbedingungen erhalten sie dann die neue Form

$$|E_W\rangle = |E\rangle + |R\rangle = 0. \tag{2.6}$$

Die Residuen R stellen in der Kostenfunktion einen mit W_R gewichteten Strafterm dar, der die gleiche Form wie der Datenterm in (2.1) hat. Im Unterschied zum Datenterm haben die "Bogusdaten"¹, mit denen R verglichen wird, den Wert 0:

$$\mathcal{J}_P = \mathcal{J} + \langle R | W_R | R \rangle = 0. \tag{2.7}$$

¹bogus (*engl.*): falsch, Schwindel . . .

Wenn man nun die Modellvariablen um die Modellresiduen erweitert und das Modell E durch E_W ersetzt, ergibt sich das Minimum der Kostenfunktion (2.7) wie bei dem oben beschriebenen Vorgehen bei harten Nebenbedingungen.

2.4 Statistische Interpretation der adjungierten Methode

"Maximum Likelihood Function" - Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Verteilung \mathcal{N} einer Gaußschen Zufallsvariablen x ist durch den Mittelwert (besten Schätzwert) μ und die Fehlerkovarianz Σ eindeutig bestimmt:

$$\mathcal{N}(\mu, \Sigma) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\langle x - \mu | \Sigma^{-1} | x - \mu \rangle\right].$$
 (2.8)

Es fällt sofort auf, dass das Argument der Exponentialfunktion in (2.8) die gleiche Form hat wie die Kostenfunktion (2.1). Bezeichnet man mit x_0 den "wahren" Wert der Modellvariablen, mit dem man die Messungen $|d\rangle$ exakt reproduzieren kann, dann kann man m in der Nähe von x_0 entwickeln:

$$|m(x)\rangle = |m(x_0)\rangle + m' |x - x_0\rangle + \dots$$
 (2.9)

In (2.1) eingesetzt erhält man unter Berücksichtigung von $|m(x_0)\rangle = |d\rangle$

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2} \langle x - x_0 | (m')^T W m' | x - x_0 \rangle, \qquad (2.10)$$

so dass, wenn man \mathcal{J} als Argument der Exponentialfunktion einer Gaußverteilung interpretiert, die Hessematrix $\mathbf{H} = (m')^T W m'$ mit der Inversen der Kovarianzmatrix der normalverteilten Zufallvariablen x identifiziert werden kann (Thacker, 1989). Aus diesem Blickwinkel betrachtet, stellt die Lösung des Minimierungsproblems aus Abschnitt 2.3 denjenigen Zustand des Systems dar, der der Messung d zufolge nach (2.8) am wahrscheinlichsten ist. Tatsächlich ist die Minimierung der Kostenfunktion \mathcal{J} mit der Maximierung der sogenannten "Maximum Likelihood Function"

$$L(x_0, \mathbf{H}^{-1}) = Z^{-1} \exp(-\mathcal{J})$$
(2.11)

gleichbedeutend. Diese Wahrscheinlichkeitsdichte ist mit der Konstanten Z so normiert, dass ihre Integration über den gesamten Phasenraum von x eins ergibt. Die Fehlerkovarianz der unabhängigen Modellvariablen x erhält man dann als das Ensemblemittel der Abweichungen von x_0 bezüglich der Wahrscheinlichkeitsdichte (2.11)

$$C_{xx} = E[|x - x_0\rangle\langle x - x_0|] = \mathbf{H}^{-1}.$$
 (2.12)

 $|x - x_0\rangle\langle x - x_0|$ ist als Produkt von Spalten- mit Zeilenvektor eine Matrix.

Im Fall eines nichtlinearen Modells bleiben diese Betrachtungen anwendbar, solange das absolute Minimum der Kostenfunktion (2.1) tief genug ist, so dass die Hessematrix

$$\mathbf{H} = \underbrace{(m')^T W m'}_{\mathbf{H}_{linear}} + (m'')^T W | d - m \rangle$$
(2.13)

im Minimum durch ihre linearisierte Form genähert werden kann. Man beachte, dass im nichtlinearen Anteil der Hessematrix mit $(m'')_{ijk} = \partial^2 m_i / \partial x_j \partial x_k$ ein Tensor 3. Stufe auftritt.

Stabilität der Lösung und a posteriori Fehler

Die Stabilität δ^2 kann als Abweichung der Lösung x vom optimalen Zustand x_{opt} , für den die Kostenfunktion \mathcal{J} ein globales Minimum hat, definiert werden:

$$\delta^{2} \stackrel{\text{def}}{=} E\left[\langle x - x_{opt} | g | x - x_{opt} \rangle\right] = \operatorname{tr}\left(\mathbf{H}^{-1}\right) = \sum_{k} \epsilon_{k}^{-1}, \qquad (2.14)$$

mit den Eigenwerten ϵ_k der Hessematrix

$$\mathbf{H}|\varphi_k\rangle = \epsilon_k |\varphi_k\rangle. \tag{2.15}$$

Die Metrik g definiert das Skalarprodukt im Raum der unabhängigen Modellvariablen (siehe auch Abschnitt 2.5.5). Entlang der Richtungen φ_k , die zu kleinen Eigenwerten $\epsilon_k \rightarrow 0$ gehören, ist die Kostenfunktion flach. Die Position des optimalen Wertes x_{opt} , der die Kostenfunktion minimiert, ist in diesen Richtungen unsicher, und ihr Beitrag dominiert δ^2 .

Auf der anderen Seite hängt die Stabilität einer Observablen davon ab, ob ihre Gradienten senkrecht auf diesen Eigenvektoren stehen oder nicht. Analog zu (2.9) kann jede skalare Observable ψ_m , die Funktion der Modellvariablen x ist, durch eine Entwicklung um x_{opt} linearisiert werden:

$$\psi_m(x) = \psi_m(x_{opt}) + \langle \psi'_m | x - x_{opt} \rangle \quad \text{mit } \psi'_m = \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{x = x_{opt}}$$
(2.16)

Ebenso wie man als Fehlerkovarianz der Modellvariablen die inverse Hessematrix erhält, kann man die Fluktuationen der Observablen ψ berechnen:

$$C_{mn} \stackrel{\text{def}}{=} E\left[(\psi_m(x) - \psi_m(x_{opt}))(\psi_n(x) - \psi_n(x_{opt}))\right]$$
$$= \langle \psi'_m | \mathbf{H}^{-1} | \psi'_n \rangle = \sum_k \langle \psi'_m | g | \varphi_k \rangle \frac{1}{\epsilon_k} \langle \varphi_k | g | \psi'_n \rangle.$$
(2.17)

Der Beitrag des k-ten Eigenwertes zur Kovarianz C_{mn} wird mit den Koeffizienten $\langle \psi'_m | g | \varphi_k \rangle$ und $\langle \psi'_n | g | \varphi_k \rangle$ gewichtet. Deshalb bedeutet eine schlechte Kondition der

Hessematrix (wenigstens ein sehr kleiner Eigenwert) nicht notwendigerweise, dass die Kovarianz von ψ_m und ψ_n nicht bestimmt werden kann, denn für ein kleines $\epsilon_k \to 0$ kann für die Komponente von ψ die Amplitude $\langle \psi' | g | \varphi_k \rangle = 0$ sein und damit keinen Beitrag zu der Fluktuation von ψ liefern.

Zur quantitativen Beschreibung der Hessematrix und der Fehlerkovarianz der Observablen ψ werden hier die Källén-Lehmann Spektralfunktionen $F_H(\epsilon)$ und $F_{mn}(\epsilon)$ verwendet (siehe z.B. Itzykson und Zuber, 1990; Kreyszig, 1978; Reed und Simon, 1970):

$$dF_{H}(\epsilon) = \sum_{k} \delta(\epsilon - \epsilon_{k}) d\epsilon, \qquad F_{H}(0) = 0 \qquad (2.18)$$

$$dF_{mn}(\epsilon) = \sum_{k} \delta(\epsilon - \epsilon_{k}) \langle \psi'_{m} | g | \varphi_{k} \rangle \langle \varphi_{k} | g | \psi'_{n} \rangle d\epsilon, \quad F_{mn}(0) = 0, \qquad (2.19)$$

 $\delta(\epsilon - \epsilon_k)$ wird auch als Spektraldichte und $dF_H(\epsilon)$ als Spektralmaß von H bezeichnet. Diese Funktionen weisen an den Eigenwerten der Hessematrix Sprünge auf. $F_H(\epsilon) = \int_0^{\epsilon} dF_H(\epsilon')$ ist monoton steigend, die Höhe ihrer Sprünge gibt die Dimension des dazugehörigen invarianten Unterraums an. Die zweite Funktion $F_{mn}(\epsilon)$ springt an den Diskontinuitäten um das Produkt der Zerlegung von ψ'_m und ψ'_n in die Eigenvektoren der Hessematrix. Falls m = n, ist auch diese Funktion monoton steigend. Mit diesen Definitionen bekommen (2.14) und (2.17) die Form

$$\delta^2 = \int_0^\infty \frac{1}{\epsilon} dF_H(\epsilon), \qquad C_{mn} = \int_0^\infty \frac{1}{\epsilon} dF_{mn}(\epsilon).$$
(2.20)

Wenn die Hessematrix singulär ist, bedeutet das für mindestens eine Linearkombination von unabhängigen Variablen, dass sie unbestimmt ist, bzw. formal einen unendlichen Fehler hat. In diesem Fall kann man die Matrix selbst nicht invertieren, sondern höchstens eine Pseudoinverse aus den inversen positiven Eigenwerten bilden. Die aus dieser Pseudoinversen nach Gleichung (2.17) berechneten Fehler unterschätzen die wirklichen formalen Fehler um den Beitrag des Nullraumes { $\varphi_k | \epsilon_k = 0$ } der Hessematrix (siehe z.B. Wunsch, 1996).

2.5 Ein inverses Modell für die Analyse hydrographischer Schnitte

Nechaev und Yaremchuk (1995) stellten ein nichtlineares, stationäres Modell vor, das wie die Boxmodelle auf den thermischen Windgleichungen, zusätzlich aber auf Vorticityerhaltung und einer lokalen Spurenstoffbalance basiert. Im Gegensatz zu den linearen Boxmodellen sind in diesem Modell neben der Referenzgeschwindigkeit auch aktive und passive Spurenstoffe (Temperatur, Salzgehalt, Sauerstoff, Silikat, Nitrat, Phosphat, CFC's, ...) unabhängige Modellvariablen. Die Behandlung des Minimierungsproblems geschieht mit Hilfe der adjungierten Methode. In weiteren Veröffentlichungen wird das Modell auf einen hydrographischen Schnitt quer über das Weddellmeer (Yaremchuk *et al.*, 1998) und auf einen Schnitt südlich von Australien angewendet (Yaremchuk *et al.*, 2000b). Das Modell von Nechaev und Yaremchuk (1995) wird in diesem Abschnitt weiterentwickelt.

2.5.1 Modellgleichungen

Die physikalische Aufgabenstellung, die dieses Modell bearbeitet, besteht darin, aus den hydrographischen Messgrößen Salzgehalt, Temperatur und eventuell weiteren Spurenstoffen wie zum Beispiel Sauerstoff oder CFCs entlang eines hydrographischen Schnittes die großräumigen, langsamen hydrographischen und dynamischen Felder zu schätzen. Großräumige, langsame Bewegungen im Ozean befinden sich im geostrophischen Gleichgewicht, das durch die thermischen Windgleichungen ausgedrückt werden kann (siehe z.B. Pedlosky, 1987, 51 ff.):

$$\frac{\partial \mathbf{u}_g}{\partial z} = -\frac{g}{\rho_0 f} (\mathbf{k} \times \nabla \rho). \tag{2.21}$$

 $f = 2\Omega \sin \phi$ ist der von der geographischen Breite ϕ abhängige Coriolisparameter, g die Erdbeschleunigung und ρ_0 eine mittlere Dichte, wie sie sich aus der Boussinesq Approximation (siehe z.B. Gill, 1982) ergibt. Das lokale Koordinatensystem hat seine x-Richtung (Einheitsvektor i) entlang des Schnittes und seine y-Richtung (Einheitsvektor j) senkrecht dazu. Die Vertikale erhält den Einheitsvektor k. Aus den thermischen Windgleichungen können wiederum die horizontalen geostrophischen Strömungsgeschwindigkeiten $\mathbf{u}_g = u_g \mathbf{i} + v_g \mathbf{j}$ (+0 k) tangential und normal zu einem hydrographischen Schnitt durch Integration gewonnen werden:

$$\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{ref} + \frac{g}{\rho_0 f} \int_{-H}^{z} \mathbf{k} \times \nabla \rho \, dz = 0.$$
(2.22)

Die unbekannten Referenzgeschwindigkeiten \mathbf{u}_{ref} werden als Geschwindigkeiten am Boden z = -H(x, y) gewählt.

Die geostrophische Vertikalgeschwindigkeit w_g kann durch Integration der stationären linearisierten quasigeostrophischen Vorticitygleichung

$$f\frac{\partial w_g}{\partial z} - \nabla_h f \cdot \mathbf{u}_g = 0 \tag{2.23}$$

gewonnen werden. Für diese Vertikalgeschwindigkeit gibt es jedoch zwei Randbedingungen, jeweils eine für die Oberfläche (z = 0) und eine für den Boden (z = -H), die im Allgemeinen nicht gleichzeitig erfüllt sein können. Um dieses Problem zu umgehen, differenzierten Nechaev und Yaremchuk (1995) Gleichung (2.23) nach z und ersetzten $\partial \mathbf{u}_g / \partial z$ durch die thermischen Windgleichungen (2.21), um eine Gleichung zweiter Ordnung für w zu erhalten:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{g}{\rho_0 f^2} (\mathbf{k} \times \nabla \rho) \cdot \nabla f = 0.$$
(2.24)

Mit den Randbedingungen an der Oberfläche w_0 und am Boden w_{-H} lautet die Lösung nach Nechaev und Yaremchuk (1995):

$$w_{NY}(z) = w_0 - A(0) + [w_0 - w_{-H} - A(0)] \frac{z}{H} + A(z),$$

mit $A(z) = \frac{g}{\rho_0 f^2} \int_{-H}^{z} \int_{-H}^{z'} (\mathbf{k} \times \nabla \rho) \cdot \nabla f \, dz'' \, dz'.$ (2.25)

 w_{NY} erfüllt die quasigeostrophische Vorticitygleichung nur, wenn die Differenz der Randbedingungen durch den Beitrag des mittleren horizontalen Transports A(0) balanciert wird; ein Umstand, der jedoch keine Allgemeingültigkeit besitzt.

Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit die linearisierte quasigeostropische Vorticitygleichung (2.23) direkt zur Berechnung von w_g verwendet. Als Randbedingung am Boden dient:

$$w_g(-H) + (\mathbf{u}_{ref} \cdot \nabla_h H + q_{-H}) = 0 \tag{2.23a}$$

wobei durch q_{-H} in ihrer Größe unbekannte Fehler eingehen. Zu diesen gehören die Ungenauigkeit, mit der die Bodenneigung ∇H bekannt ist, und die Vernachlässigung der vertikalen Ekmangeschwindigkeit bei flachem Boden. Die Lösung

$$w_g(z) = w_g(-H) + \frac{\nabla f}{f} \int_{-H}^{z} \mathbf{u}_g(z') \, dz'$$
(2.26)

erfüllt bei z = 0 die Oberflächenrandbedingung von verschwindender Vertikalgeschwindigkeit bis auf den Fehler q_{τ} . Nach Pedlosky (1996) kompensieren sich an der Oberfläche die geostrophische Komponente $w_g(0)$ und die windgetriebene Ekmankomponente $w_{ek}(0) = -(\mathbf{k} \times \nabla)(\tau/f)/\rho_0$, so dass dort die Randbedingung lautet:

$$w_g(0) - \left(\frac{(\mathbf{k} \times \nabla) (\boldsymbol{\tau}/f)}{\rho_0} + q_{\boldsymbol{\tau}}\right) = 0.$$
 (2.23b)

 q_{τ} kann als Fehler der Windschubspannung τ interpretiert werden.

Das Dichtefeld entlang des Schnittes berechnet man mit der nichtlinearen Zustandsgleichung für Meerwasser (Fofonoff und Millard, 1983)

$$\rho - R(S, T, p) = 0 \tag{2.27}$$

als Funktion von Salzgehalt *S*, *in situ* Temperatur *T* und Druck *p*. Die potentielle Temperatur $\theta = \theta(S, T, p, p_0)$ relativ zum atmosphärischen Druck p_0 , Salzgehalt *S* und einige andere Spurenstoffe sind Erhaltungsgrößen (siehe z.B. Gill, 1982). In diesem Modell sollen sie die stationäre advektive Balance

$$\mathbf{u} \cdot \nabla_h C_n + w \frac{\partial C_n}{\partial z} - q_n = 0 \tag{2.28}$$

mit $\mathbf{u} = \mathbf{u}_g + \mathbf{u}_{ek}$ und $w = w_g + w_{ek}$ erfüllen. Die unbekannten Quellterme q_n beschreiben vom Modell nicht auflösbare Prozesse für die hydrographischen Parameter $C_n = \theta, S, \ldots$. Dazu gehören die turbulente Diffusion, die entlang eines zweidimensionalen Schnittes ohne zusätzliche Informationen nicht vollständig in allen drei Dimensionen erfasst werden kann, und Prozesse biologischer und chemischer Natur. Die horizontale Geschwindigkeit \mathbf{u}_{ek} beschreibt die unmittelbar windgetriebene oberflächennahe Strömung der bekannten Ekmanspirale (siehe z.B. Pedlosky, 1987, 226 ff.). Die vertikale Geschwindigkeit w_{ek} ergibt sich aus der Kontinuitätsgleichung (Pedlosky, 1996):

$$\frac{\partial w_{ek}}{\partial z} = -\nabla \cdot \mathbf{u}_{ek} \quad \text{mit} \quad w_{ek}(0) = -\frac{(\mathbf{k} \times \nabla) \left(\boldsymbol{\tau}/f\right)}{\rho_0}.$$
(2.29)

Das langsame, großräumige Bewegungsfeld soll des weiteren eine *a priori* Schätzung des totalen Volumentransports ϕ_V senkrecht durch den Schnitt reproduzieren:

$$\iint_{\Omega} v \, dz \, dx - (\phi_V + \delta \phi_V) = 0. \tag{2.30}$$

 $\delta \phi_V$ ist dabei der unbekannte Fehler dieser Schätzung, Ω die gesamte Schnittebene. Temperaturtransporte werden auf die gleiche Art durch Integration des Produktes aus Geschwindigkeit, Dichte, spezifischer Wärme bei konstantem Druck c_p und potentieller Temperatur berechnet:

$$\phi_{\theta} = \iint_{\Omega} \rho c_p \theta v \, dz \, dx. \tag{2.31}$$

Für hydrographische Schnitte mit verschwindendem Massenfluss ist dieser Ausdruck eine sehr gute Näherung für den Energiefluss durch den Schnitt (Warren, 1999). Da die vorliegende Arbeit aber auch einen Schnitt mit großem Massentransport behandelt, wird hier durchgängig der Begriff Temperaturtransport relativ zu 0°C verwendet.

Als ausdrückliche Neuerung werden in dieser Arbeit die Modellvariablen um die Oberflächenauslenkung ζ erweitert, um Messungen derselben berücksichtigen zu können. Die geostrophische Oberflächengeschwindigkeit v_g normal zum Schnitt ist proportional zur Neigung der Oberfläche:

$$v_g = \frac{g}{f} \frac{\partial \zeta}{\partial x}.$$
(2.32)

Die Modellvariable ζ wird durch Integration dieser geostrophischen Gleichung an der Oberfläche bestimmt:

$$\zeta(x) - \hat{P}\mathbf{u} = 0 \tag{2.33}$$

mit

$$\hat{P}\mathbf{u} = \int_{0}^{x} \frac{f}{g} v_g(x', z=0) \, dx' - \frac{1}{L} \int_{0}^{L} \int_{0}^{x'} \frac{f}{g} v_g(x'', z=0) \, dx'' \, dx',$$

wobei L die Gesamtlänge des Schnittes ist. Die Daten wie die Modellwerte werden dabei so normiert, dass ihr Mittelwert verschwindet. Die windgetriebene Strömung an der Oberfläche (Ekmanregime) erzeugt keine Druckrandschicht und deshalb auch keine Oberflächenauslenkung (Wunsch und Stammer, 1998).

2.5.2 Kostenfunktion

Gesucht wird nun derjenige vollständige Satz unabhängiger Modellvariablen $p = \{C_n, \mathbf{u}_{ref}, q_{-H}\}$, der folgende Kostenfunktion \mathcal{J} mit den "harten" Nebenbedingungen (2.22), (2.27) und (2.33) minimiert:

$$\mathcal{J} = \underbrace{\mathcal{J}_{C} + \mathcal{J}_{\mathbf{u}} + \mathcal{J}_{\zeta}}_{\text{Datenterme}} + \underbrace{\mathcal{J}_{\tau} + \mathcal{J}_{-H} + \mathcal{J}_{q} + \mathcal{J}_{\phi_{V}}}_{\text{,,weiche" Nebenbedingungen}} + \underbrace{\mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}} + \mathcal{J}_{\partial_{y}C} + \mathcal{J}_{\hat{S}C} + \mathcal{J}_{\hat{S}q} + \mathcal{J}_{\hat{S}\mathbf{u}}}_{\text{Regularisierungsterme}}$$
(2.34)

Die ersten drei Terme

$$\mathcal{J}_{C} = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \int_{0}^{L} \int_{-H}^{0} \int_{-H}^{0} dz \, dz' \, dx \dots$$

$$\dots (\hat{\Phi}_{C}C_{m}(x,z) - C_{m}^{*}(x,z)) W_{mn}(x,z,z') (\hat{\Phi}_{C}C_{n}(x,z') - C_{n}^{*}(x,z'))$$
(2.35)

$$\mathcal{J}_{\zeta} = \frac{1}{2} \int_{0}^{L} \int_{0}^{L} (\hat{\Phi}_{\zeta}\zeta(x) - \zeta^{*}(x)) W_{\zeta}(x, x') (\hat{\Phi}_{\zeta}\zeta(x') - \zeta^{*}(x')) \, dx' \, dx \tag{2.36}$$

$$\mathcal{J}_{\mathbf{u}} = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} (\hat{\Phi}_{\mathbf{u}} \mathbf{u} - \mathbf{u}^*) W_{\mathbf{u}} (\hat{\Phi}_{\mathbf{u}} \mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \, dx \, dz \tag{2.37}$$

ermöglichen die Anpassung des Modells an Messungen der Parameter C_n , der Oberflächenauslenkung ζ und der Geschwindigkeiten u. Die Messungen dieser Größen sind T

durch einen Stern (*) gekennzeichnet. Die Operatoren $\hat{\Phi}$ interpolieren die Modellvariablen auf die Messpunkte. Die nächsten vier Terme

$$\mathcal{J}_{\tau} = \frac{1}{2} \int_{0}^{L} W_{\tau} q_{\tau}^{2} dx \qquad \text{(Oberflächenrandbedingung für } w\text{)}, \qquad (2.38)$$

$$\mathcal{J}_{-H} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\pi} W_{-H} q_{-H}^{2} dx \qquad \text{(Bodenrandbedingung für } w\text{)}, \qquad (2.39)$$

$$\mathcal{J}_q = \frac{1}{2} \sum_n \iint_{\Omega} W_{q_n} q_n^2 \, dz \, dx \quad \text{(Erhaltungsgleichung für } C_n\text{)}, \tag{2.40}$$

$$\mathcal{J}_{\phi_V} = \frac{1}{2} W_{\delta\phi_V} (\delta\phi_V)^2 \qquad (\text{Transportschätzung}) \tag{2.41}$$

minimieren die Residuen der "weichen" Nebenbedingungen, die nicht exakt erfüllt sein müssen. Die Terme für die Randbedingungen der Vertikalgeschwindigkeit \mathcal{J}_{τ} und \mathcal{J}_{-H} könnten auch als Datenterme interpretiert werden, da in ihnen auch eine Anpassung an die Messung der Windschubspannung bzw. der Bodenneigung erfolgt. Das wird zwar für die Wahl der Gewichte von Bedeutung, dennoch werden diese Terme hier zu den Nebenbedingungen gezählt, weil zum einen die Messungen von τ und $\nabla_h H$ sehr unzuverlässig sind und zum anderen die Fehler q_{τ} und q_{-H} neben Messfehlern auch Vernachlässigungsfehler der Gleichungen (2.23a) und (2.23b) enthalten. Genauso wird auch durch \mathcal{J}_{ϕ_V} das Modell nicht an eine Messung, sondern an eine *a priori* Schätzung angepasst, weshalb dieser Term nicht zu den Datentermen zählt.

Alle übrigen Terme dienen der Regularisierung des Problems, indem sie zusätzlich *a priori* Informationen über die gesuchten Felder einführen:

$$\mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}} = \frac{1}{2} \int_{0}^{L} W_{\mathbf{u}_{ref}} (\mathbf{u}_{ref} - \mathbf{u}_{ref}^{*})^2 dx$$
(2.42)

$$\mathcal{J}_{\partial_y C} = \frac{1}{2} \sum_n \iint_{\Omega} W_{\partial_y C_n} \left(\frac{\partial C_n}{\partial y} - \frac{\partial C_n}{\partial y}^* \right)^2 dz \, dx \tag{2.43}$$

$$\mathcal{J}_{\hat{S}C} = \frac{1}{2} \sum_{n} \iint_{\Omega} W_{\hat{S}C_{n}}(\hat{S}_{c}C_{n})^{2} dz dx$$
(2.44)

$$\mathcal{J}_{\hat{S}q} = \frac{1}{2} \sum_{n} \iint_{\Omega} W_{\hat{S}q_n} (\hat{S}_q q_n)^2 \, dz \, dx \tag{2.45}$$

$$\mathcal{J}_{\hat{S}\mathbf{u}} = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} W_{\hat{S}\mathbf{u}} (\hat{S}_u \mathbf{u})^2 \, dz \, dx \tag{2.46}$$

 $\mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}}$ und $\mathcal{J}_{\partial_y C}$ bilden zusammen mit \mathcal{J}_C und \mathcal{J}_{-H} die Hintergrundterme für die unabhängigen Modellvariablen. Wo nicht genügend unabhängige Informationen in Form von Messungen und zusätzlichen Annahmen vorhanden sind, dienen Hintergrundfelder als ihr Ersatz. Diese Felder sollten auf die jeweilige Anwendung des Modells abgestimmt sein. In den letzten drei Termen der Kostenfunktion wird die Glattheit der Felder C_n , q_n und u gefordert. Ein Laplaceoperator der Form $\hat{S}_k = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z})\nu_k(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z})^T$ repräsentiert die Glattheit. Die Metrik ν_k hängt dabei von dem Feld ab, auf das S_k angewandt wird. Neben ihrer regularisierenden Funktion kann man den Glattheitstermen auch eine physikalische Interpretation geben. Mit ihrer Hilfe wird die Annahme realisiert, dass die physikalischen Felder nicht beliebig rauh sind (Thacker, 1988a). Ebenso können durch eine entsprechende Wahl ihrer Gewichte "ageostrophisches Rauschen" und Fehler in den Messdaten auf der Skala des Rechengitters unterdrückt werden (Yaremchuk *et al.*, 1998).

2.5.3 A priori Fehler

Nach der expliziten Formulierung der Kostenfunktion und der "harten" Nebenbedingungen bestimmen die Gewichte W die Lösung des inversen Problems. Die in ihnen enthaltenen Informationen über Genauigkeit der Messungen und Gültigkeit der Modellannahmen definieren die "physikalisch akzeptierbaren" Abweichungen des zu schätzenden Zustands von einem stationären Zustand in geostrophischem Gleichgewicht. Mathematisch betrachtet gestalten sie den Lösungsraum der Kostenfunktion. Deshalb ist es Teil der Formulierung eines inversen Modells, die Gewichte sorgfältig zu wählen. Nach der statistischen Interpretation der Kostenfunktion als Argument der Exponentialfunktion einer "Maximum Likelihood Function" (siehe Abschnitt 2.4) sind die Inversen der Fehlerquadrate und Fehlerkovarianzen der gewichteten Größen die natürliche Wahl für diese Gewichte. Diese Wahl setzt allerdings voraus, dass sämtliche behandelte Größen normalverteilt sind. Weiter wird angenommen, dass *a priori* die Korrelationen zwischen den einzelnen Termen der Kostenfunktion vernachlässigbar sind.

Im Folgenden sollen nun alle in der Kostenfunktion (2.34) auftretende Gewichte näher erläutert werden.

Messungen

 $W_{mn}(x, z, z')$: Die klassischen Messungen eines hydrographischen Schnittes sind sehr genaue *in situ* Bestimmungen von Temperatur, Salzgehalt und eventuell weiteren Spurenstoffen. Die Messgenauigkeiten belaufen sich auf 0.005 °C für Temperatur, 0.003 PSU für Salzgehalt und 1% und weniger für die übrigen Größen (Rosenberg *et al.*, 1995b). Viel größer sind die Fehler, die durch zu grobe Messgitter ("Aliasing"), durch zeitabhängige Felder (entgegen der Annahme synoptischer Messungen, die durch endliche Geschwindigkeit des Messschiffs nicht realisiert werden kann) und durch Ungenauigkeiten der Navigation entstehen. Diese Fehler werden hier nach Bindoff und McDougall (1994) durch die horizontale Varianz der Differenzen zwischen



Abb. 2.1: Schätzung des "Ozeanrauschens" für den WOCE Schnitt SR3 nach Bindoff und McDougall (1994). Die durchgezogenen Linien stellen ein mittleres Salzgehalts- bzw. Temperaturprofil dar, während die graue Schattierung die Variabilität bezeichnet.

jeweils zwei benachbarten Messstationen abgeschätzt. Für Temperatur (Salzgehalt) haben sie die Größenordnung von $0.1 \,^{\circ}$ C (0.01 PSU) in oberflächennahen Schichten und $0.01 \,^{\circ}$ C (0.001 PSU) in der Tiefsee (siehe auch Abb. 2.1). Zusätzlich zu diesen als unkorreliert angenommenen Fehlern soll eine Korrelation aller hydrographischen Größen untereinander sowie eine vertikale Korrelation berücksichtigt werden. Die Messgrößen c_n in der Tiefe z werden dazu als unabhängige normalverteilte Zufallsvariablen betrachtet, die an jeder Messstation einmal realisiert werden. Damit würde man voraussetzen, dass der beobachtete Ozean in horizontaler Richtung statistisch homogen ist. Diese Annahme ist jedoch nicht realistisch. Stattdessen soll angenommen werden, dass sich die horizontale Homogenität näherungsweise auf nahe beieinander liegende Stationen beschränkt. Der Erwartungswert für die Größe c_n in der Tiefe z ist dann:

$$\mu_n(z) = E[c_n(x,z)] = \int_0^L K(x,x')c_n(x',z)\,dx,$$
(2.47)

mit dem Kern $K(x, x') = Z^{-1} \exp[-(x - x')^2/(2\sigma^2)]$, der nur für Stationen in der Nähe von x wesentliche Beiträge liefert. $Z = \int_0^L \exp[-(x - x')^2/(2\sigma^2)] dx$ ist dabei eine Normierungskonstante. Mit dem gleichen Kern wird die Kovarianz gebildet:

$$C_{mn}(x, z, z') = E\left[(c_m(x', z) - \mu_m(z))(c_n(x', z') - \mu_n(z'))\right]$$

=
$$\int_0^L K(x, x')(c_m(x', z) - \mu_m(z))(c_n(x', z') - \mu_n(z')) dx.$$
 (2.48)

Die Gewichte W_{mn} können dann durch Inversion der Summe aus den quadrierten unkorrelierten Fehlern und der Kovarianz C_{mn} gewonnen werden.

 $W_{\zeta}(x, x')$: Die Fehlerabschätzung der mittleren Oberflächenauslenkung stellt eine der Hauptaufgaben dieser Arbeit dar. Die Fehler setzen sich in der Hauptsache aus den unmittelbaren Messfehlern im Altimetersignal, der Bestimmung einer zuverlässigen mittleren Topographie aus den vorhandenen Zeitserien und nicht zuletzt aus den Fehlern in der Geoidbestimmung zusammen. Die Wahl der Gewichte W_{ζ} wird in Kapitel 3 ausführlich beschrieben.

 $W_u(x)$: Zuverlässige Messungen der horizontalen Geschwindigkeit sind kostspielig und aufwändig und demzufolge nur in kleiner Zahl vorhanden. Es ist dadurch sehr schwierig, die statistischen Eigenschaften der Messungen zu erfassen. Aus diesem Grund werden alle Messungen als unkorreliert behandelt und die Gewichte als die inversen Quadrate der lokalen Messfehler gesetzt. Diese haben bei zeitlichen Mittelwerten von langen Zeitreihen aus Verankerungsmessungen die Größenordnung von 1–4 cm/s (siehe z.B. Fahrbach *et al.*, 1992, 1994). Bei modernen schiffsgestützten ADCP (Acoustic Doppler Current Profiler) Messungen kommt zu den Messfehlern von O(4-6 cm/s) (Bersch, 1995) noch die geschätzte Abweichung des gemessenen Zustands von seinem Mittelwert hinzu. Diese dürfte die gleiche Größenordnung wie die Fehler der Verankerungsmessung haben.

"Weiche" Nebenbedingungen

 W_{τ} und W_{-H} : Die Windschubspannung τ und die Vertikalkomponente ihrer Rotation wird durch ein klimatologisches Mittel von ECMWF Reanalyse Daten (Trenberth *et al.*, 1990) geschätzt, dessen Standardabweichung zur Schätzung des Fehlers $\delta q_{\tau} = \delta(\mathbf{k} \times \nabla \tau)/(\rho_0 f) = W_{\tau}^{-1/2}$ führt. Die *a priori* Fehler der Bodenrandbedingung sind nicht so einfach abzuschätzen. Die lokale Bodenneigung ist nur unzulänglich bekannt. Sie wird aus dem bathymetrischen Datensatz ETOPO5 durch finite Differenzen geschätzt (NOAA, 1988). Die Genauigkeit des Datensatzes variiert von 1 m bis 150 m. Die Auflösung ist zu grob (5' × 5'), um lokale Gradienten exakt zu bestimmen. Deshalb werden die inversen Gewichte $(W_{-H})^{-1}$ auf 50% der horizontalen Varianz des Betrages der Bodenneigung gesetzt. Die Vernachlässigung der vertikalen Ekmangeschwindigkeit bei horizontalem Boden ist von höherer Ordnung und wird nicht berücksichtigt.

 W_{q_n} : q_n können als diejenigen Quellen der Größe C_n aufgefasst werden, die nötig sind, um die Lösung in einem stationären Zustand zu halten. Als Gewichte werden die inversen horizontalen Varianzen der ersten Schätzung von q_n vor der Minimierung der Kostenfunktion verwendet. Da aber die Gradienten $\partial C_n / \partial y$ senkrecht zum Schnitt klein sind, weil sie zu null oder aus klimatologischen Daten geschätzt werden müssen, ergeben sich hier sehr kleine Varianzen. Um diesen Zustand zu umgehen, werden die Anfangsfelder C_n mit einem gleichverteilten Rauschen versehen, das vertikal mit der horizontalen Varianz der Differenzen zwischen jeweils zwei benachbarten Messstationen (siehe Beschreibung der Gewichte W_{mn}) gewichtet wurde. Aus mehreren Realisationen dieser verrauschten Felder können nun ebenso mit Rauschen behaftete Realisationen von q_n berechnet werden. Mit deren inverser horizontaler Varianz wiederum ist eine Abschätzung der vertikalen Verteilung der Gewichte W_{q_n} gefunden. Ihre endgültige Größe muss darauf abgestimmt werden, in welchem Maße die Erhaltungsgleichung (2.28) erfüllt sein soll.

 $W_{\delta\phi_V}$: Der Fehler der *a priori* Schätzung des totalen Volumentransports ist stark von dem betrachteten Schnitt abhängig. Bei einem transatlantischen oder einem ein Randmeer umschließenden Schnitt ist der totale Volumentransport bis auf 0.1 Sv (1 Sv = 10⁶m³/s) aus einfachen Erhaltungsüberlegungen bekannt. Dagegen ist das Ziel einer Analyse eines Schnittes quer über den Antarkischen Zirkumpolarstrom unter anderem gerade die Bestimmung dieses Transports, so dass in diesem Fall auf seine *a priori* Schätzung ganz verzichtet werden sollte.

Regularisierung

 $W_{u_{ref}}$ und $W_{\partial_y C_n}$: In dem vorliegenden Modell sind die Referenzgeschwindigkeiten u_{ref} und die Gradienten der hydrographischen Felder senkrecht zur Schnittrichtung $\partial_y C_n$ a priori unbekannt, da sie nicht direkt gemessen werden. Um die Unterbestimmung des inversen Problems aufzuheben, müssen die fehlenden Messungen durch unabhängige Schätzungen ersetzt werden. Die Gradienten lassen sich aus einem klimatologischen Datensatz (z.B. Levitus *et al.*, 1994; Levitus und Boyer, 1994; Gouretski und Jancke, 1998) schätzen. Eine Schätzung der Referenzgeschwindigkeiten am Boden kann man wie bei der dynamischen Methode (Abschnitt 2.1) durch eine Wassermassenanalyse und der Ermittlung einer Nullschicht erhalten. In beiden Fällen sind die Ungenauigkeiten jedoch groß, sei es durch die Form des Datensatzes (Auflösung) oder durch den subjektiven Charakter der Schätzung, so dass große Fehler angenommen werden müssen. Als Gewichte der Gradienten werden die inversen horizontalen Varianzen verwendet; die Gewichte der Referenzgeschwindigkeit sind die inversen Fehler-



Abb. 2.2: Schema des Modellgitters.

quadrate, wobei diese Fehler auf O(1 cm/s) in der Tiefsee und bis O(10 cm/s) in den westlichen Randströmen geschätzt werden.

 $W_{\hat{S}C_n}$, $W_{\hat{S}q_n}$ und $W_{\hat{S}u}$: Für die Glattheitsforderungen leiten sich die Gewichte aus ihrer physikalischen Interpretation ab. Die kleinskaligen Komponenten der Temperatur-, Salzgehalts- und Spurenstoffverteilungen C_n und der von diesen abgeleiteten Größen q_n und u sollen auf einen bestimmten Bruchteil ihrer *a priori* Schätzungen reduziert werden. Dazu werden die inversen horizontalen Varianzen dieser Schätzungen mit dem entsprechenden Faktor multipliziert.

2.5.4 Diskretisierung

Die Gleichungen (2.22) bis (2.33) werden auf dem in Abb. 2.2 skizzierten Modellgitter durch finite Differenzen approximiert. Dieses Gitter ist wie folgt aufgebaut: Die Messpunkte von Temperatur, Salzgehalt und eventuell weiteren Spurenstoffen (\bullet) bilden das zweidimensionale Messgitter mit dem horizontalen Abstand Δx_i zwischen dem *i*-ten Stationspaar und der Dicke Δz_k der *k*-ten horizontalen Schicht. Auf jeder Seite dieses Messgitters liegt im Abstand $\Delta y/2$ jeweils ein identisches Gitter, auf dessen Knoten die Modellvariablen ρ und θ , T, S, usw. definiert sind (\diamond). Durch diese Wahl erhält der Interpolationsoperator für diese Variablen die einfache Form $\hat{\Phi}_C C = \frac{1}{2}(C_{-\Delta y/2} + C_{\Delta y/2})$. Δy wird auf den mittleren Stationsabstand gesetzt. Jeweils acht dieser Dichtepunkte bilden eine Gitterbox, in deren Zentrum die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten u und v sowie die Quellterme q_n der Gleichung (2.28) definiert sind (\circ). Diese Größen werden als repräsentativ für die gesamte Gitterbox betrachtet. Auf der Oberseite bzw. Unterseite einer Gitterbox befindet sich der Gitterpunkt für die Vertikalgeschwindigkeit w (\bullet). Die Referenzgeschwindigkeit \mathbf{u}_{ref} liegt für jedes Stationspaar jeweils auf dem tiefsten *w*-Punkt. Die Oberflächentopographie ζ wird auf den Oberflächenpunkten des Messgitters (\blacklozenge) ausgewertet.

Die Struktur des Modellgitters erlaubt, in einigen Fällen nach Mittelung der Größen ρ , θ , T, S, usw. auf die Seitenflächen einer Gitterbox, die Approximation aller partiellen Ableitungen durch zentrale Differenzen. Die Integration der thermischen Windgleichung (2.22) und der quasigeostrophischen Vorticitygleichung (2.26) erfolgt ebenso wie die Integration der Geschwindigkeit in (2.30) und (2.33) auf natürliche Weise durch die Mittelpunktsregel (z.B. Schwarz, 1988, 319 ff.).

2.5.5 Minimierungsalgorithmus und Präkonditionierung

Das Minimum der Kostenfunktion (2.34) kann man aufgrund der Form der Modellgleichungen nicht explizit angeben, ebensowenig wie die Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen (2.3) und (2.5). Stattdessen sucht man das Minimum mit einem iterativen Verfahren. Aus der Vielzahl der Verfahren (siehe z.B. Press *et al.*, 1992; Gill *et al.*, 1988) wird hier die Routine M1QN3 der MODULOPT Bibliothek gewählt, die den BFGS-Algorithmus, ein Quasi-Newton Verfahren mit variablem Speicherbedarf, implementiert (Gilbert und Lemaréchal, 1989). Der dazu notwendige Gradient der Kostenfunktion relativ zu den unabhängigen Variablen *p* kann im Prinzip aus den Euler-Lagrange Gleichungen berechnet werden. Eine praktische Alternative dazu stellt die automatische Differenzierung des Programmcodes durch den "TAMC" dar. Dieser Tangent Linear Adjoint Model Compiler (Giering, 1999) generiert aus der numerischen Implementierung der Modellgleichungen (2.22) – (2.33) Fortran Programmcode, der den Gradienten der Kostenfunktion bezüglich der unabhängigen Variablen berechnet. Dieser Teil der Rechnung wird auch als adjungiertes Modell bezeichnet. Der vollständige Algorithmus zur Minimierung ist in Abb. 2.3 skizziert.

Um eine Minimierung der Kostenfunktion (2.34) mit Hilfe eines Abstiegsalgorithmus durchführen zu können, muss noch ein Skalarprodukt im Raum der unabhängigen Variablen $p = \{C_n, \mathbf{u}_{ref}, q_{-H}\}$ definiert werden:

$$\langle p, p' \rangle = \langle p | g | p' \rangle.$$
 (2.49)

Die Metrik g dient in erster Linie dazu, die Kondition (= größter Eigenwert/kleinster Eigenwert) der Hessematrix H zu verbessern, d.h. zu verkleinern. Nach der geometrischen Interpretation einer Kostenfunktion mit schlecht konditionierter Hessematrix weisen diejenigen Richtungen im Raum der unabhängigen Variablen, zu denen kleine Eigenwerte gehören, nur sehr flache Minima auf. Rundungsfehler können dann dazu führen, dass der Minimierungsalgorithmus die Richtung, in der diese Minima liegen, nicht als Abstiegsrichtung erkennt. Auf der anderen Seite weist der Gradient der Kostenfunktion für eine gute Kondition von O(1) vom Startpunkt der Minimierung näherungsweise vom globalen Minimum weg, so dass nur wenige, im besten Fall nur eine, Abstiegsrichtung notwendig ist und der Minimierungsalgorithmus schnell konvergiert.

In der Praxis wird zur Präkonditionierung der Gradient mit einer Matrix multipliziert, so dass dieses Produkt den Idealfall einer einzigen Abstiegsrichtung besser



Abb. 2.3: Minimierungsalgorithmus (nach de las Heras und Schlitzer, 1999).

approximiert. Da der linearisierte Gradient durch

$$\left|\nabla_{p}\mathcal{J}\right\rangle = \mathbf{H}\left|p - p_{0}\right\rangle \tag{2.50}$$

gegeben ist, ist der optimale Präkonditionierer $g = \mathbf{H}^{-1}$, denn der Vektor $p_0 - p$ zeigt direkt auf das Minimum p_0 . Also sollte g eine Näherung der inversen Hessematrix sein (Thacker, 1989). Dies wird bei dem BFGS-Algorithmus (Gilbert und Lemaréchal, 1989) bereits berücksichtig. Die Präkonditionierermetrik g skaliert zusätzlich die unabhängigen Variablen mit einer Schätzung ihrer horizontalen Varianz aus dem Anfangszustand.

2.5.6 Fehlerrechnung für Systeme mit vielen Unbekannten

Bei den inversen Methoden werden, wie in Abschnitt 2.4 angedeutet, neben den Lösungen ihre Fehler abgeschätzt. Dabei ist die Inverse der Hessematrix der Kostenfunktion für Aussagen über die Stabilität der Lösung ebenso wie für die Abschätzung der Fehler selbst zentral. Bei Systemen mit mehreren tausend unabhängigen Modellvariablen stellt jedoch die Berechnung der Inversen der Hessematrix hohe Anforderungen an Speicherplatzbedarf und Rechenzeit. Bei noch mehr Unabhängigen muss man auf iterative Methoden ausweichen. So kann man zur Schätzung der Fehler der skalaren Ob-
servablen ψ die Gleichung

$$\mathbf{H}|X\rangle = |\psi'\rangle \tag{2.51}$$

mit Hilfe eines konjugierten-Gradienten-(CG-)Verfahren lösen (z.B. Yaremchuk *et al.*, 1998). Dazu ist lediglich mehrfach die Multiplikation der Hessematrix mit einem Vektor nötig. Eine solche Routine kann mit dem TAMC (Giering, 1999), der schon zur Gradientenberechnung der Kostenfunktion verwendet wird, erzeugt werden. Der geschätzte Fehler von ψ ist dann nach Konvergenz von (2.51)

$$\delta\psi = \sqrt{\langle \psi' | X \rangle}.$$
(2.52)

Ebenso ist die Berechnung von Fehlerkovarianzen zwischen Observablen möglich.

Bei iterativen Verfahren hängt die Konvergenz von (2.51) von der Konditionszahl C der Matrix H ab. Bei sehr schlechter Kondition benötigt ein CG-Verfahren theoretisch genauso viele Iterationen wie die Dimension der Hessematrix, um die Lösung von (2.51) zu finden. Bei mehreren 1000 bis 10000 Modellvariablen kann man sich einerseits diesen Rechenaufwand nicht leisten, andererseit ist bei Abbruch der Iteration (zum Beispiel wegen eines "weichen" Abbruchkriteriums) keine Information darüber erhältlich, wie zuverlässig das Gleichungssystem gelöst worden ist.

Ein alternatives Verfahren zur Schätzung der *a posteriori* Fehler einer Observablen wurde von Yaremchuk und Schröter (1998) und Yaremchuk *et al.* (2000a) entwickelt. Bei dieser Methode wird das Spektrum der Hessematrix durch eine endliche Zahl von Polynomen approximiert und dann der Vektor

$$\Psi = \sum_{k} |\varphi_{k}\rangle \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{k}}} \langle \varphi_{k} | \psi' \rangle = \mathbf{H}^{-1/2} | \psi' \rangle$$
(2.53)

berechnet. Die geschätzte Kovarianz zwischen der *m*-ten und *n*-ten Variable erhält man aus

$$C_{mn} = \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle. \tag{2.54}$$

Genauso wie bei (2.51) ist hier nur die Multiplikation der Hessematrix mit einem Vektor notwendig. Die Zahl der Aufrufe dieser Operation, die nötig ist, um das ganze Spektrum der Hessematrix aufzulösen, ist proportional zu \sqrt{C} . Das heisst, für große Konditionszahlen C und sehr große Dimension der Hessematrix ist dieses Verfahren günstiger als ein CG-Verfahren. Ein weiterer fundamentaler Vorteil dieser Methode besteht darin, dass man anhand des genäherten Spektrums der Hessematrix, bzw. der Källén-Lehmann Spektralfunktionen F_H und F_{mn} (siehe Abschnitt 2.4) überprüfen kann, ob das gesamte Spektrum aufgelöst wurde, oder ob eine größere Zahl von Iterationen notwendig ist, um zuverlässige Fehlerschätzungen zu erhalten.

Im Falle einer Hessematrix mit sehr großer Konditionszahl *C* kann das Verfahren von Yaremchuk und Schröter keine besseren Fehlerschätzungen als beispielsweise ein CG-Verfahren liefern, jedoch ist im Gegensatz zu Letzterem eine Analyse und Bewertung der gewonnenen Fehler möglich. In dieser Arbeit wird, soweit nicht anders vermerkt, für Fehlerrechnungen die Methode von Yaremchuk und Schröter verwendet.

Kapitel 3

Oberflächenauslenkung aus Satellitenaltimetrie

Will man die allgemeine Zirkulation des Ozeans aus Messungen ableiten, stößt man auf Probleme, die sich aus den physikalischen Eigenschaften des Meerwassers ergeben. Seine Undurchlässigkeit gegenüber elektromagnetischer Strahlung (Licht!) verhindert eine einfache Beobachtung der tiefen Zirkulation. Für das riesige zu beobachtende Volumen sind ozeanographische Forschungsschiffe zu langsam und in zu kleiner Zahl vorhanden, um ausreichend Messdaten zusammenzutragen. Satellitengestützte Beobachtungssysteme stellen eine vernünftige Alternative zu von Schiffen aus durchgeführten *in situ* Messungen für die Untersuchung von großskaligen bis globalen Phänomenen dar. Die Lichtundurchlässigkeit des Meerwassers beschränkt jedoch auch diese Methoden auf die Beobachtung von Eigenschaften nahe oder an der Oberfläche selbst: Oberflächentemperatur, Farbe, Dielektrizitätskonstante, Streuquerschnitte, etc. Allerdings sind die Zusammenhänge dieser Oberflächengrößen mit der Tiefenzirkulation kompliziert, indirekt und schwach.

Die einzige physikalische Eigenschaft der Meeresoberfläche, die direkt die dreidimensionale, großskalige Strömung wiederspiegelt, ist die Oberflächenauslenkung. Ihre Neigung ist nach den Prinzipien der Geostrophie direkt proportional zu oberflächennahen Strömungen, die sich wiederum bis zu ihrer Kompensation in große Tiefen fortsetzten. (Wunsch und Stammer, 1998).

3.1 Satellitenaltimetrie

Die geometrische Anordnung bei der Messung der Oberflächenauslenkung mit Hilfe von Satellitenaltimetrie ist in Abb. 3.1 skizziert. Der Satellit mit dem Altimeter fliegt auf einer Umlaufbahn mit dem Radius $H(\theta, \lambda, t)$ um die Erde. Dieser Radius ist eine Funktion des Azimuthwinkels θ , der geographischen Länge λ und der Zeit t. Das Altimeter bestimmt den Abstand $d(\theta, \lambda, t)$ zwischen sich und der physikalischen Meeresoberfläche, indem es die Zeit misst, die ein Signal braucht, um von seinem Radar zur Erde und wieder zurück zu gelangen. Die Meereoberfläche $S(\theta, \lambda, t)$ relativ



Abb. 3.1: Meereshöhenmessung mit einem Satelliten (nach Wunsch und Stammer, 1998)

zum Erdmittelpunkt erhält man aus

$$S(\theta, \lambda, t) = H(\theta, \lambda, t) - d(\theta, \lambda, t)$$
(3.1)

Wäre der Ozean in Ruhe, stellte $S(\theta, \lambda)$ eine Äquipotentialfläche mit dem Radius $r_g(\theta, \lambda) = N(\theta, \lambda) + E(\theta, \lambda)$ dar, der "Höhe des Geoids". Dabei ist E ein Referenzellipsoid (Heiskanen und Moritz, 1967). Die Geoidundulation $N(\theta, \lambda)$ bezüglich des Referenzellipsoids wird häufig auch selbst als Geoid bezeichnet, obwohl sie streng genommen eine Höhe repräsentiert, während das Geoid eine Äquipotentialfläche des Schwerefeldes ist. Die gesuchte Oberflächenauslenkung erhält man dann aus

$$\zeta(\theta, \lambda, t) = H(\theta, \lambda, t) - N(\theta, \lambda) - E(\theta, \lambda) - d(\theta, \lambda, t),$$

und mit der Meereshöhe h = H - E - d relativ zum Referenzellipsoid

$$\zeta(\theta, \lambda, t) = h(\theta, \lambda, t) - N(\theta, \lambda).$$
(3.2)

Da die Umlaufbahn des Satelliten etwa 1000 km über der Erdoberfläche liegen muss, bedeutet die Forderung nach einer Genauigkeit von wenigen Zentimetern, dass H und N auf den Faktor 10^{-8} genau bekannt sein müssen. Die Messungen von h werden durch eine Atmosphäre hindurch gemacht, in der zeitlich variabler Wasserdampfgehalt und Vorkommen von freien Elektronen in der Ionosphäre die Ausbreitungsgeschwindigkeit von elektromagnetischer Strahlung in der Größenordnung verändern, wie sie Fluktuationen der Oberflächenauslenkung entsprechen, die sehr viel größer sind als O(1 cm). Die Meeresoberfläche selbst ist ein kompliziertes dreidimensionales stochastisches Feld, dessen Wechselwirkungen mit dem Radarpuls das Signal zwischen Emission und Absorption am Messgerät stark modifizieren. Eine Reihe von Korrekturen müssen deshalb an der eigentlichen Messung angebracht werden, um diese und weitere Probleme zu behandeln. Eine Übersicht der notwendigen Korrekturen findet man bei Wunsch und Stammer (1998) am Beispiel der TOPEX/Poseidon-Mission.

In den Anfängen der Satellitenaltimetrie in den 70er Jahren des 20. Jahrhunderts mit einem Messgerät auf Skylab (McGoogan, 1975), GEOS-3 und SEASAT (Douglas *et al.*, 1987) waren die Messungen der Meereshöhe *h* viel zu ungenau (O(1–10 m)), um sie für ozeanographische Belange verwenden zu können. Die Geosat-Mission in den 80er Jahren bedeutete einen großen Fortschritt in der Satellitenaltimetrie. Erstmals konnten aus diesen Daten ozeanographische Erkenntnisse gewonnen werden. Ferner erhielt die Wissenschaft die Gelegenheit, umfangreiche Erfahrungen mit diesem Datentyp zu sammeln. Für eine Beurteilung der Geosat Ergebnisse wird auf Douglas und Cheney (1990), Verron (1992) und Fu und Cheney (1995) verwiesen.

Als erste Satellitenmission, deren Hauptzweck die Beobachtung der allgemeinen Zirkulation des Ozeans war, startete 1992 die französisch-US-amerikanische TOPEX/Poseidon-Mission. Die Genauigkeit von O(2–3 cm) des Altimeters an Bord des Satelliten, mit der die Meeresoberfläche vermessen werden konnte, übertraf die bis dahin bestehenden Möglichkeiten um mehr als eine Größenordnung. Eine Beschreibung der technischen Einzelheiten dieser Mission findet man bei Fu *et al.* (1994). Gleichzeitig mit der TOPEX/Poseidon-Mission betrieb die ESA (European Space Agency) ihren ersten "Environmental Research Satellite" (ERS-1), dessen Altimeterdaten aber nicht die Qualität von TOPEX/Poseidon erreichen konnten. Sein Nachfolger ERS-2 (Start: 1995) stellt jedoch eine wertvolle Ergänzung zur TOPEX/Poseidon-Mission dar. Die beiden Satelliten zeichnen sich durch unterschiedliche räumliche und zeitliche Auflösungen aus. So liegen die "Groundtracks" von ERS-2 näher beieinander und reichen auch weiter zu den Polen (82°) als die von TOPEX/Poseidon (66°). Auf der anderen Seite braucht der ERS-2 Satellit 35–168 Tage, um wieder an den gleichen Punkt zu gelangen, TOPEX/Poseidon dagegen nur etwa 10.

Die mittlerweile mehrjährigen Zeitreihen der Altimeterdaten der verschiedenen Missionen wurden in großem Umfang zu Studien der ozeanischen Variabilität verwendet. Übersichten findet man bei Wunsch und Stammer (1998) und Fu und Cheney (1995).

Neben der zeitlichen Variabilität lässt sich eine mittlere Meeresoberfläche $S(\theta, \lambda)$ schätzen (z.B. Hernandez und Schaeffer, 2000; Yi, 1995; Wang, 2000; Anzenhofer *et al.*, 1996), die als ein Oberflächenbild der mittleren dreidimensionalen Zirkulation des Ozeans angesehen werden kann.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich ausschließlich mit Schätzungen der absoluten Meeresoberflächenauslenkung, für die man als Referenzfläche ein Geoid benötigt.

3.2 Das Geoidproblem

Aus Gleichung (3.2) in Abschnitt 3.1 wird klar, dass eine präzise Kenntnis des Geoids für die Bestimmung der absoluten Meeresoberflächenauslenkung ζ notwendig ist. Die Amplituden der Geoidundulation N betragen etwa 100 m, die Größenordnung der Meeresoberflächenauslenkung etwa 1–2 m (siehe als Beispiel Abb. 3.2). Deshalb stellt aus geophysikalischer Sicht die Meereshöhe h bereits eine gute Näherung des Geoids dar. Aus jeglicher zusätzlicher Kenntnis der Ozeanzirkulation lässt sich eine Schätzung der Oberflächenauslenkung ζ_{Ozean} ableiten, die im Prinzip zu einem verbesserten Geoid $h - \zeta_{Ozean}$ führt. Für ozeanographische Anwendungen braucht man aber unabhängige Messungen des Geoids, da hier eine genaue Schätzung der Oberflächenauslenkung $\zeta = h - N$ interessiert. Das Problem der gleichzeitigen Bestimmung von Geoid und Oberflächenauslenkung ist bei Wunsch und Gaposchkin (1980) beschrieben.

Durch moderne Methoden der Geoidbestimmung (z.B. Schweremessungen auf der Erdoberfläche, Satellitenbahnbestimmung ("satellite tracking"), satellitengestützte Schweremessungen, siehe Seeber, 1989) stehen seit einigen Jahren Geoidmodelle zur Verfügung, deren Genauigkeiten wenigstens im langwelligen Bereich die Größenordnung von Dezimetern erreichen (Nerem *et al.*, 1994; Schwintzer *et al.*, 1997; Lemoine *et al.*, 1997).

In der üblichen spektralen Darstellung der Geoidundulation durch Kugelflächen-funktionen Y_{lm}

$$N(\theta, \lambda) = R \sum_{l=0}^{L} \sum_{|m| \le l} c_{lm} Y_{lm}(\theta, \lambda)$$
(3.3)

zeigt sich die Abhängigkeit des Geoidfehlers von Grad l und Ordnung m der Entwicklung (Abb. 3.3(a)). R bezeichnet den mittleren Erdradius. Dabei steigt im Allgemeinen die Fehlervarianz der Koeffizienten c_{lm} pro Grad mit steigendem l an, bis sie die theoretische Varianz der Koeffizienten (Kaularegel, siehe Tscherning und Rapp, 1974) selbst erreicht. Dieser Grad L beschreibt über die Faustregel $a_N \approx \pi R/L \approx$ 20000 km/L die maximale Auflösung des Geoidmodells. Die Fehler der Koeffizienten des Modells ($l \leq L$) gehören zum aufgelösten Fehler ("commission"), während die Kaularegel für l > L eine Größenordnung desjenigen Modellfehlers angibt, der durch den Abbruch der Reihenentwicklung (3.3) entsteht ("omission"-Fehler).



(a) Geoidundulation N, Konturen von -100 m bis +80 m, Konturintervall ist 10 m



(b) Oberflächenauslenkung ζ , Konturen von -140 cm bis +90 cm, Konturintervall ist 10 cm

Abb. 3.2: (a) Geoidundulation N des EGM96 Geoidmodells, relativ zum Referenzellipsoid WGS84 und (b) Oberflächenauslenkung ζ über dem Geoid aus Koeffizienten einer Kugelflächenfunktionsentwicklung bis Grad und Ordnung 20, die gleichzeitig mit den Koeffizienten des EGM96 geschätzt wurden (Lemoine *et al.*, 1997). Da $|\zeta|$ etwa zwei Größenordnungen kleiner ist als |N|, ist die Meeresoberfläche h relativ zum Referenzellipsoid (hier nicht gezeigt) in einer solchen Abbildung nicht von N zu unterscheiden.



Abb. 3.3: (a) Schematische Darstellung des Geoidfehlers, mittlere Varianz pro Grad l, (b) voraussichtlicher kumulativer Geoidfehler $(\sum_{l'=1}^{l} \sum_{m} (\delta c_{l'm})^2)^{1/2}$ der Missionen GRACE und GOCE im Vergleich mit dem EGM96 Geoidmodell (Balmino *et al.*, 1998).

Die vollständige Beschreibung des "Commission"-Fehlers eines Geoidmodells geschieht durch die Fehlerkovarianzmatrix $\langle \delta c_{lm} \delta c_{l'm'} \rangle$ der Kugelflächenfunktionskoeffizienten, wie sie sich aus der Modellrechnung ergibt. Die Fehlerkovarianz C_N zwischen zwei Punkten (θ , λ) und (θ' , λ') erhält man aus (Heiskanen und Moritz, 1967)

$$C_N(\theta,\lambda,\theta',\lambda') = R^2 \sum_{l,l'=0}^{L} \sum_{\substack{|m| \le l \\ |m'| \le l'}} Y_{lm}(\theta,\lambda) \langle \delta c_{lm} \delta c_{l'm'} \rangle Y_{l'm'}(\theta',\lambda').$$
(3.4)

Aus Abb. 3.3(b) wird deutlich, dass gegenwärtige Geoidmodelle wie das EGM96 für lange Wellen $\lambda \approx 2\pi R/l$ mit l < 10 bereits Genauigkeiten der Ordnung O(1 cm) aufweisen. Bei kürzeren Wellen nehmen die Fehler jedoch schnell zu. Aus diesem Grund sind unter anderem die Satellitenmissionen GRACE (Tapley, 1997) und GOCE (Battrick, 1999) in Planung und Vorbereitung, deren Hauptaufgabe in der Vermessung des Erdschwerefeldes besteht. Abb. 3.3(b) zeigt die erwarteten Fehler der Geoidmodelle, die durch diese Missionen möglich werden, im Vergleich zum EGM96. Im langwelligen Bereich sind durch die GRACE Mission und im Bereich bis $\lambda \approx 200$ km durch die GOCE Mission ausgezeichnete Genauigkeiten zu erwarten, die für den Gebrauch von Satellitenaltimetrie in der Ozeanographie zur Bestimmung der absoluten Zirkulation von großer Bedeutung sein können (LeGrand und Minister, 1999; Dombrowsky *et al.*, 1999).

Für das GRACE und GOCE Geoid stehen homogene und isotrope Schätzungen des "Commission"-Fehlers in Form von Fehlervarianzen pro Grad δc_l zur Verfügung

(Balmino *et al.*, 1998). Aus ihnen lässt sich die homogene und isotrope Kovarianz zweier um die sphärische Distanz ψ getrennter Punkte nach Vereinfachung von (3.4) zu

$$C_N(\psi) = R^2 \sum_{l=0}^{L} \delta c_l P_l(\cos\psi)$$
(3.5)

berechnen. Dabei sind die P_l 's gewöhnliche Legendre Polynome. Ebenso kann man die Kovarianz des Vernachlässigungsfehlers ("Omission"-Fehlers) durch die Kaularegel abschätzen (Tscherning und Rapp, 1974):

$$C_{om} = R^2 \sum_{l=L+1}^{\infty} k_l P_l(\cos\psi), \qquad k_l = \left(\frac{\sqrt{0.5} \cdot 10^{-5}}{l^2}\right)^2 (2l+1).$$
(3.6)

3.3 Fehlerschätzung für die absolute Oberflächenauslenkung

Für den Vergleich der gemessenen Oberflächenauslenkung ζ^* mit der entsprechenden Modellschätzung ζ im Kostenfunktionsterm \mathcal{J}_{ζ} (Gleichung (2.36) in Kapitel 2) braucht man eine Schätzung der Fehler der Auslenkungsdaten, mit deren Inversen die Differenz $|\zeta^* - \zeta|$ gewichtet wird. Dieses Problem wird zusätzlich dadurch komplizierter, dass sowohl die Satellitenmessung h und das Geoidmodell N, die zusammen die Messung ζ^* bilden, als auch die Modellschätzung unterschiedliche räumliche Auflösungen haben.

Die gemessene Oberflächenauslenkung ζ^* ist letztlich die Differenz zweier unabhängiger Größen: der Meereshöhe h über dem Referenzellipsoid und der Geoidundulation N. Unter Vernachlässigung etwaiger Korrelationen zwischen diesen beiden Messungen ist der Fehler von ζ^* die geometrische Summe der Fehler von h und N. Mit den Fehlerkovarianzen C_h der Meereshöhe und C_N des Geoids ergibt sich

$$C_{\zeta} = C_h + C_N. \tag{3.7}$$

Diese Gleichung gilt im strengen Sinne nur, wenn beide Beiträge die gleichen Wellenlängen beschreiben. Die Auflösung des Geoidmodells mit maximalem Grad L wird durch die Faustregel $a_N \approx \pi R/L$ abgeschätzt. Die Auflösung a_h der Meereshöhe hüber dem Referenzellipsoid ist im Allgemeinen sehr viel besser ($a_h \ll a_N$), so dass die Fehlerkovarianz C_h viel kleinere Skalen beschreibt als C_N .

Das Gleiche gilt für h und N selbst, so dass, als Beispiel, die einfache Differenz zwischen der mittleren Meereshöhe CLS_SHOM98.2 (Hernandez und Schaeffer, 2000) und dem EGM96 Strukturen aufweist, die nicht dynamischer Natur sind, sondern von Schwereanomalien entlang topographischer Besonderheiten verursacht werden (Abb. 3.4). Diese Strukturen erkennt zwar das hochauflösende Altimeter, aber ihre



Abb. 3.4: Schätzung der mittleren Oberflächenauslenkung ζ im Nordpazifik. Grau schattiert ist die Differenz h - N zwischen der MSS ("mean sea surface") CLS_SHOM98.2 (Hernandez und Schaeffer, 2000) und dem EGM96 (bis zum Grad 360). Die Konturlinien stellen das gleiche Feld nach Glättung (3.8) mit dem Gaußschen Kern (3.10) dar. Der Glättungsradius $r = \pi R/70 \approx 290$ km entspricht der Auflösung eines Kugelflächenfunktionsmodells bis zum Grad 70. Das Konturintervall beträgt 10 cm. In dem ungeglätteten Feld sind deutlich starke Auslenkungen mit Amplituden von mehreren Metern im Bereich der Aleuten, der Emperor Seamounts, des Kurilengrabens, des Hawaii- und Markus-Necker-Rückens zu sehen. Diese Strukturen haben nach heutigem Kenntnisstand keine dynamische Erklärung, sondern sind auf Unterschiede zwischen Altimeter- und Geoidmodellauflösung zurückzuführen. Nach der Glättung sind diese starken Auslenkungen entlang der topographischen Besonderheiten verschwunden.

charakteristischen Ausdehnungen liegen jenseits der Auflösung des Geoidmodells. Für eine konsistente Beschreibung der aus diesem h und N gewonnenen Auslenkung ζ^* müsste der "Commission"-Fehler des Geoidmodells C_N um einen "Omission"-Fehler erweitert werden, der genau diese Vernachlässigung der Skalen zwischen Auflösung des Geoidmodells und der Meereshöhe h berücksichtigt. Diesen "Omission"-Fehler könnte man aus der Kaularegel analog zu Gleichung (3.5) bzw. (3.6) schätzen.

Kombination und Glättung der Daten auf der Kugeloberfläche

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die kurzen Skalen (kürzer als a_N) der Meereshöhe mit einem Tiefpassfilter zu unterdrücken und auf diese Weise eine Anpassung der beiden Messungen zu erreichen. Dazu werden Meereshöhe h und Geoid N mit dem gleichen Integralkern geglättet.

$$\overline{\zeta^*(\theta,\lambda)} = \iint \left[h(\theta',\lambda') - N(\theta',\lambda')\right] K(\theta,\lambda,\theta',\lambda') \sin\theta' \,d\theta' \,d\lambda'.$$
(3.8)

Die Glättung der Fehlerkovarianz erfolgt ganz analog durch

$$\overline{C_{\zeta}(\theta,\phi,\theta',\phi')} = \iint \dots$$

$$\left(\iint C_{\zeta}(\beta,\gamma,\beta',\gamma') K(\theta',\phi',\beta',\gamma') \sin\beta' d\beta' d\gamma' \right) \dots$$

$$K(\theta,\phi,\beta,\gamma) \sin\beta d\beta d\gamma. \quad (3.9)$$

Für K gibt es eine Reihe von Möglichkeiten. Zunächst erscheint es aber sinnvoll, dass K weit weg von den Küsten radialsymmetrisch ist: $K(\theta, \lambda, \theta', \lambda') = K(\psi)$, mit der sphärischen Distanz $\psi = \measuredangle(\theta, \lambda, \theta', \lambda')$. Ein Filter, der diejenigen Wellenlängen unterdrückt, die die Auflösung a_N unterschreiten, wird von Jekeli (1981) vorgeschlagen und später von Wahr *et al.* (1998) verwendet, um langwellige Phänomene des zeitabhängigen Geoids zu untersuchen. Dieser Filter hat eine der radialsymmetrischen Gaußschen Glockenkurve ähnliche Form und ist dem Ingenieurwesen entlehnt (Abb. 3.5):

$$K(\psi) = \frac{b}{2\pi} \frac{e^{-b(1-\cos\psi)}}{1-e^{-2b}},$$

$$b = \frac{\ln(2)}{(1-\cos(\psi_{1/2}))}.$$
(3.10)

Die Größe $\psi_{1/2}$ ist diejenige sphärische Distanz, bei der K nur noch halb so groß ist wie bei $\psi = 0$. $r = R\psi_{1/2}$ nennen Wahr *et al.* Mittelungsradius. Die Koeffizienten κ_l einer Entwicklung von K in Kugelflächenfunktionen können nach Jekeli (1981)



Abb. 3.5: Filter von Jekeli (1981) und seine spektralen Eigenschaften für einen Mittelungsradius von $r = \pi R/70 \approx 290$ km. Oberhalb von l = 70 dämpft der Filter alle Beiträge sehr effektiv.

rekursiv berechnet werden:

$$\kappa_{0} = 1$$

$$\kappa_{1} = \kappa_{0} \left[\frac{1 + e^{-2b}}{1 - e^{-2b}} - \frac{1}{b} \right]$$

$$\kappa_{l+1} = -\frac{2l+1}{b} \kappa_{l} + \kappa_{l-1}$$
(3.11)

Der Nachteil dieses Filters besteht darin, dass er auch Wellenlängen, die größer sind als 2r, zum Teil stark dämpft. Jekeli (1981) untersucht noch weitere Filterkerne $K(\theta, \lambda, \theta', \lambda')$, darunter einen Pellinen-, einen Fourier- und einen Hanningfilter. Diesen gegenüber besitzt aber (3.10) die besten Dämpfungseigenschaften oberhalb von r. Für Geoidmodelle ist das sehr wichtig, da gerade die kurzen Wellen sehr große Fehler haben und deshalb effektiv gedämpft werden sollen.

Im Folgenden werden die Mittelungsbalken für ζ^* und C_{ζ} der Übersicht halber wieder weggelassen.

Extrapolation der Modellschätzung auf das Datengitter

Mit Hilfe von (3.8) kann man sich nun eine Meeresoberflächentopographie relativ zum Geoid N erstellen, die sich aus Mittelwerten mit dem Mittelungsradius $r = \psi_{1/2}R$ zusammensetzt. Die Fehler dieser Mittelwerte werden durch die ebenfalls gemittelte Fehlerkovarianz C_{ζ} konsistent beschrieben. Es ist dann sinnvoll, diese auf einem Datengitter D mit dem konstanten Gitterabstand a = r, bzw. mit einem Gitterabstand der der Auflösung der Daten entspricht, darzustellen. Das Modell aus Kapitel 2 schätzt seinerseits eine Meereshöhentopographie auf dem Modellgitter M. Dieses Gitter ist durch die hydrographischen Messtationen definiert (siehe Abschnitt 2.5.4). Daher ist seine Auflösung räumlich variabel und liegt je nach behandeltem Schnitt in der Größenordnung von 30–100 km. Sie ist also im schlechtesten Fall immer noch genauso gut wie

die zu erwartende Auflösung des hochauflösenden GOCE Geoids. Damit steht man wieder vor dem Problem, dass die zu vergleichenden Größen in der Kostenfunktion nicht die gleichen Skalen beschreiben.

Im Allgemeinen muss ein Interpolationsoperator $\hat{\Phi}_{\zeta}$ die Modellschätzung auf das Datengitter abbilden, wo dann Messung und Schätzung in einer Kostenfunktion verglichen werden können (Thacker, 1988a, 1989) (siehe auch Gleichung (2.36)):

$$\mathcal{J}_{\zeta} = \frac{1}{2} \langle \hat{\Phi}_{\zeta} \zeta - \zeta^* | C_D^{-1} | \hat{\Phi}_{\zeta} \zeta - \zeta^* \rangle.$$
(3.12)

Die Gewichtsmatrix C_D^{-1} ist die Inverse der Fehlerkovarianzmatrix $C_D = C_{\zeta}$ der auf dem Gitter D dargestellten Oberflächenauslenkung ζ^* . In dieser Untersuchung kann man den Operator $\hat{\Phi}_{\zeta}$ aber nicht ohne weiteres bestimmen, da die Modellschätzung nur entlang einer Linie vorliegt, während die Messungen Flächenmessungen sind. Der Operator $\hat{\Phi}_{\zeta}$ übernimmt hier die Filterung der kurzwelligen Anteile der Modellschätzung (kürzer als die Auflösung a des Datengitters).

Um eine Extrapolation der Modellschätzung auf das Datengitter konstruieren zu können, wird zunächst ein Operator \hat{Q}_{ζ} definiert, der die Daten von dem regelmäßigen Datengitter D auf das unregelmäßige eindimensionale Modellgitter M abbildet. In der Praxis kann diese Abbildung auch gleichzeitig die Glättung (3.8) enthalten. Im Allgemeinen ist die Abbildung \hat{Q}_{ζ} nicht umkehrbar. Stattdessen wird die Abbildung $\hat{\Phi}_{\zeta}$ als Pseudoinverse von \hat{Q}_{ζ} konstruiert. Die Singulärwertzerlegung von \hat{Q}_{ζ} lautet:

$$|M\rangle = \hat{Q}_{\zeta}|D\rangle = \sum_{k} |v_k\rangle s_k \langle u_k|g_D|D\rangle, \qquad (3.13)$$

mit den singulären Vektoren $|u_k\rangle$ im Datenraum und $|v_k\rangle$ im Modellraum, den Singulärwerten s_k und der Metrik g_D des Datenraumes, so dass $\langle u_k | g_D | u_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$. $|D\rangle$ und $|M\rangle$ sind Elemente der Räume D und M. Eine Abbildung vom Modellgitter auf das Datengitter ergibt sich damit zu:

$$|D\rangle = \hat{\Phi}_{\zeta}|M\rangle = \sum_{s_k \neq 0} |u_k\rangle s_k^{-1} \langle v_k | g_M | M \rangle.$$
(3.14)

Hier ist g_M die Metrik des Modellraumes, mit $\langle v_k | g_M | v_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$.

Regularisierung

Wenn der Operator \hat{Q}_{ζ} eine große Konditionszahl (= größter Singulärwert/kleinster Singulärwert) aufweist, wird es notwendig, seine Pseudoinverse zu regularisieren. Sonst besteht die Gefahr, dass durch sehr kleine Singulärwerte s_k kleine verrauschte Beiträge von $|M\rangle$ ungewollt verstärkt werden und dadurch die Rekonstruktion von $|M\rangle$ auf dem Datengitter verschlechtern. Dies ist besonders dann der Fall, wenn \hat{Q}_{ζ} die Glättung (3.8) enthält. Bei der hier gewählten Regularisierung wird die exakte Inversion der Singulärwerte s_k^{-1} durch ein genähertes Inversionsfenster $I(s_k)$ ersetzt, das das Rauschen auf dem Modellgitter unterdrückt. Als erstes Kriterium für die Konstruktion dieses Fensters kann man voraussetzen, dass die Amplituden der Oberflächenauslenkung auf dem Datengitter den Wert σ_{max} nicht überschreiten dürfen. Dazu genügt es für die einzelnen Beiträge der Summe (3.14) zu fordern:

$$\left\| u_k \right\|_{\infty} I(s_k) \le \sigma_{max}. \tag{3.15}$$

 σ_{max} versteht sich dabei lediglich als obere Schranke und könnte beispielsweise eine mittlere oder die größte gemessene Auslenkungsamplitude sein. Weiterhin darf sich der regularisierte Operator \tilde{Q}_{ζ} nur wenig von dem exakten Operator \hat{Q}_{ζ} unterscheiden. Dies soll hier dadurch erreicht werden, dass für alle k, für die (3.15) *nicht* gilt, sowohl $s_k = 0$ als auch $I(s_k) = 0$ gesetzt wird. Die Pseudoinverse des regularisierten Operators wirkt dann wie folgt auf die Modellwerte:

$$|D\rangle = \tilde{\Phi}_{\zeta}|M\rangle = \sum_{k} |u_{k}\rangle I(s_{k}) \langle v_{k}|g_{M}|M\rangle.$$
(3.16)

Wahl der Metriken

Für den Datenraum ist die natürliche Wahl für g_D die Gewichtsmatrix C_D^{-1} aus der Kostenfunktion (3.12), da sie genau den Abstand zwischen Datenwerten und Modellschätzungen beschreibt. Die Basisvektoren $|u_k\rangle$ erhält man, indem man die Eigenvektoren von C_D mit ihren Eigenwerten normiert, so dass

$$\langle u_k | C_D^{-1} | u_{k'} \rangle = \delta_{kk'}.$$

Die Metrik des Modellraumes M wird durch das Maß bestimmt, das die Abweichung von der optimalen Oberflächenauslenkung definiert.

$$\delta^2 = \sum_M \left(\zeta - \zeta^{opt}\right)^2, \text{ so dass } g_M = 1.$$
(3.17)

Glättung der Modellschätzung

Das Minimum von \mathcal{J}_{ζ} in Gleichung (3.12) erhält man für:

$$\begin{aligned} |\zeta\rangle &= \left(\hat{\Phi}_{\zeta}^{T}C_{D}^{-1}\hat{\Phi}_{\zeta}\right)^{-1}\hat{\Phi}_{\zeta}^{T}C_{D}^{-1}|\zeta^{*}\rangle \\ &= \sum_{k} \left(\sum_{k'} g_{M}|v_{k'}\rangle s_{k'}^{-2}\langle v_{k'}|g_{M}\right)^{-1} g_{M}|v_{k}\rangle s_{k}^{-1}\langle u_{k}|g_{D}|\zeta^{*}\rangle \\ &= \sum_{k} |v_{k}\rangle s_{k}\langle u_{k}|g_{D}|\zeta^{*}\rangle = \hat{Q}_{\zeta}|\zeta^{*}\rangle \end{aligned}$$
(3.18)

also genau für die exakte Abbildung der Daten auf das Modellgitter durch Q_{ζ} . Das bedeutet, dass unabhängig von der gewählten Regularisierung $I(s_k)$ in der Kostenfunktion nur Skalen angepasst werden können, die länger als die Auflösung *a* des Datengitters sind. Die kleinen Wellenlängen der Modellschätzung auf Modellgitterskala werden dadurch unterdrückt, so dass die Lösung (3.18) nur eine bereits tiefpassgefilterte Oberflächenauslenkung sein kann.

Damit Modell und Daten auf den selben Skalen miteinander verglichen werden können, muss ζ mit einem zu \hat{Q}_{ζ} möglichst äquivalenten Operator in einer Dimension geglättet werden. Dafür ist eine zusätzliche Annahme über die räumlichen Eigenschaften der Oberflächenauslenkung senkrecht zum hydrographischen Schnitt notwendig. Da der Filter (3.10) schnell abfällt, genügt es, von der Modellschätzung der Oberflächenauslenkung anzunehmen, dass sie senkrecht zum hydrographischen Schnitt wenigstens über den doppelten Mittelungsradius 2a nahezu konstant ist. Diese Annahme stellt keine fundamentale Einschränkung dar, weil in der Kostenfunktion nur Wellenlängen betrachtet werden können, die größer sind als 2a. Auf der anderen Seite steht sie in gewissem Widerspruch dazu, dass die horizontale Geschwindigkeit tangential zum Schnitt in dem inversen Modell mitmodelliert wird. Diese Geschwindigkeitskomponente impliziert aber einen nicht verschwindenden Normalgradienten der Oberflächenauslenkung.

In Gleichung (3.18) wird also $|\zeta\rangle$ durch $|\overline{\zeta}\rangle = \hat{Q}_{\zeta}^{(1D)}|\zeta\rangle$ ersetzt. $\hat{Q}_{\zeta}^{(1D)}$ hat die gleiche Form wie \hat{Q}_{ζ} , nur bildet er den Modellraum M auf sich selbst ab. Dann motiviert (3.18) eine neue Kostenfunktion, bei der die tiefpassgefilterten Daten mit der geglätteten Modellschätzung auf dem Modellgitter M verglichen werden:

$$\mathcal{J}_M = \frac{1}{2} \langle \overline{\zeta} - \hat{Q}_{\zeta} \zeta^* | W_M | \overline{\zeta} - \hat{Q}_{\zeta} \zeta^* \rangle.$$
(3.19)

Die Gewichtsmatrix W_M sollte die Inverse der Abbildung der Datenfehlerkovarianzmatrix auf das Modellgitter C_M sein. Diese Inverse existiert im Allgemeinen nicht. Dennoch kann man jetzt mit Hilfe des Inversionsfensters $I(s_k)$ eine Pseudoinverse konstruieren, denn

$$C_M = \hat{Q}_{\zeta} C_D \hat{Q}_{\zeta}^T = \sum_k |v_k\rangle s_k^2 \langle v_k|.$$
(3.20)

Wenn man s_k^{-1} durch das Inversionsfenster ersetzt, erhält man die Gewichtsmatrix

$$W_M = \sum_k g_M |v_k\rangle I(s_k)^2 \langle v_k | g_M.$$
(3.21)



Abb. 3.6: Ausschnitt des Modellgebiets des (1/3)° Nordatlantikmodells der FLAME Gruppe mit hydrographischem Schnitt. Grau schattiert ist die mittlere Oberflächenauslenkung im elften Modelljahr.

Die Kostenfunktion (3.19) wird dann zu

$$\mathcal{J}_{M} = \sum_{k} \left| \langle \overline{\zeta} - \hat{Q}_{\zeta} \zeta^{*} | g_{M} | v_{k} \rangle \right|^{2} I(s_{k})^{2}$$

$$= \sum_{k} \left| \langle \overline{\zeta} | g_{M} | v_{k} \rangle - s_{k} \langle \zeta^{*} | g_{D} | u_{k} \rangle \right|^{2} I(s_{k})^{2}$$

$$= \sum_{k} \left| \langle \overline{\zeta} | g_{M} | v_{k} \rangle I(s_{k}) - \langle \zeta^{*} | g_{D} | u_{k} \rangle \right|^{2}.$$
(3.22)

Es werden zur Auswertung der Kostenfunktion also nur diejenigen Koeffizienten verwendet, die von der Abbildung vom Modellgitter auf das Datengitter $\hat{\Phi}_{\zeta} : M \longmapsto D$ rekonstruiert werden können. Auf diese Weise werden die kurzwelligen Anteile der Modellschätzung, die von den Daten aufgrund ihrer Auflösung nicht beschrieben werden, automatisch gefiltert.

Anwendungsbeispiel

Entlang 24°30'N im Nordatlantik wird ein fiktiver hydrographischer Schnitt gelegt (Abb. 3.6). Der Stationsabstand ist im Osten 1° geographische Länge auf dem Breitenkreis. Nach Westen hin verkleinert sich der Stationsabstand auf (1/3)°, da man hier die dynamisch interessante Floridastraße besser auflösen möchte. Die "gemesse-



Abb. 3.7: Oben: Spektrum des Abbildungsoperators \hat{Q}_{ζ} , die Kreise markieren diejenigen Singulärwerte, für die Kriterium (3.15) mit $\sigma_{max} = 2$ m gilt. **Unten:** Singuläre Vektoren $|v_k\rangle$ der bei der Regularisierung behaltenen Singulärwerte.

ne" Oberflächenauslenkung im Bereich diese Schnittes ist ein Jahresmittel des (1/3)°-Nordatlantikmodells der FLAME Gruppe (Redler *et al.*, 1998, siehe auch Kapitel 5).

Die Fehler der Auslenkung ζ setzen sich aus der Fehlerkovarianzmatrix des EGM96 bis Grad und Ordnung 70, einem homogenen, isotropen Geoidfehler bis L = 180 und einem homogenen unkorrelierten Fehler für h von 4 cm zusammen. Da der Fehler des EGM96 nur bis L = 70 durch eine volle Kovarianzmatrix gegeben ist, soll das ganze Modell nur bis zu diesem Grad als zuverlässig betrachtet werden.¹ Als Mittelungsradius des Operators \hat{Q}_{ζ} wird deshalb $r = \pi R/70$ gewählt. Abb. 3.7 (oben) zeigt das Spektrum der Abbildung. Ebenfalls wird dort angedeutet, welche Singulärwerte bei der Regularisierung behalten werden, wenn $\sigma_{max} = 2$ m. Die singulären Vektoren $|v_k\rangle$ dieser Singulärwerte im Modellraum in Abb. 3.7 (unten) weisen augenscheinlich keine kurzwelligen Anteile auf. Die durch \hat{Q}_{ζ} auf den Schnitt abgebildete

¹Tatsächlich gibt es Hinweise darauf, dass die Fehler des EGM96 ingesamt unterschätzt sind (siehe Kapitel 6).



Abb. 3.8: Oberflächenauslenkung entlang des hydrographischen Schnittes aus Abb. 3.6. ζ ist die "Modellschätzung", $\hat{Q}_{\zeta}\zeta^*$ die auf das Modellgitter abgebildeten "Daten". Der Operator \hat{P} projiziert auf die bei der Regularisierung behaltenen singulären Vektoren $|v_k\rangle$ (siehe Abb. 3.7 unten). $\hat{Q}_{\zeta}^{(1D)}$ ist das eindimensionale Analogon zu \hat{Q}_{ζ} .

Oberflächenauslenkung $\hat{Q}_{\zeta}|\zeta^*\rangle$ ist demzufolge glatter als die durch bilineare Interpolation gewonnene (Abb. 3.8, oben). Letztere enthält deutlich mehr kurzwellige Anteile und soll hier als hochauflösende Modellschätzung $|\zeta\rangle$ angesehen werden. In der gleichen Abbildung (Abb. 3.8, unten) ist die Projektion $\hat{P}|\zeta\rangle$ dieser bilinear interpolierten Auslenkung auf diejenigen singulären Vektoren zu sehen, die bei der Regularisierung von \hat{Q}_{ζ} behalten werden. Diese Projektion ist ebenfalls glatt, aber die Differenz zu $\hat{Q}_{\zeta}|\zeta^*\rangle$ (3.2 cm im quadratischen Mittel) unterstreicht die Schwierigkeiten, die beim Übergang von zwei Dimensionen auf eine auftreten. Offenbar erreicht man eine bessere Übereinstimmung (1.6 cm Differenz im quadratischen Mittel) zwischen geglätteten Daten und Modellschätzung, wenn bei Letzterer die kurzwelligen Anteile mit $\hat{Q}_{\zeta}^{(1D)}$ herausgefiltert werden.

Die Differenz zwischen $\hat{Q}_{\zeta}|\zeta^*\rangle$ und $\hat{Q}_{\zeta}^{(1D)}|\zeta\rangle$ zeigt, welche Auswirkungen die Annahme der (in diesem Fall) meridionalen Homogenität von ζ hat. In einem realistischen

Fall, in dem zur Zeit noch keine hochauflösenden Daten zur Verfügung stehen, wird man die Gültigkeit dieser Annahme nicht im Einzelnen überprüfen können. Selbst in dem hier gewählten Zwillingsvergleich, in dem "Daten" und "Modellschätzung" identisch sind, führt diese Annahme noch zu deutlichen Unterschieden zwischen den geglätteten Größen.

3.4 Zusammenfassung

Mit moderner Satellitenaltimetrie ist man in der Lage, die Meereshöhe relativ zu einem Referenzellipsoid genau zu vermessen. Die dynamisch relevante Oberflächenauslenkung um die Äquipotentialfläche des Geoids kann man aufgrund der gegenwärtigen Geoidmodelle nur mit begrenzter Auflösung und Genauigkeit angeben. Dabei steigt der Fehler bei kleinen Skalen sehr schnell. Deshalb sind nur verhältnismäßig großräumige Mittelwerte der Auslenkung zufriedenstellend genau.

Die Schätzung der dynamischen Oberflächenauslenkung durch das inverse Modell entlang des hydrographischen Schnittes unterscheidet sich von den Auslenkungsdaten in zweierlei Hinsicht. Sie enthält viel kleinere Wellenlängen, und sie ist nur eindimensional. Um Modellschätzung und Daten gleichermaßen zu glätten, damit sie in einer Kostenfunktion direkt verglichen werden können, muss man annehmen, dass die Modelloberflächenauslenkung senkrecht zum Schnitt über zwei Glättungsradien konstant ist. Aufgrund seiner guten Dämpfungseigenschaften im kurzwelligen Bereich wird ein Glättungsoperator mit einer der Gaußschen Glockenkurve ähnlichen Form zur Filterung verwendet.

In der Kostenfunktion werden nur diejenigen Komponenten der Oberflächenauslenkung verglichen, deren Strukturen auf dem Datengitter darstellbar sind. Diese Strukturen können mit einer Singulärwertzerlegung der Abbildungen zwischen Modell- und Datengitter ermittelt werden.

Kapitel 4

Möglichkeiten und Grenzen des Modells

4.1 Prinzipielle Möglichkeiten

In Kapitel 2 wurde ein inverses geostrophisches, stationäres Modell beschrieben, das zunächst aus hydrographischen Daten allein eine Schätzung des dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeldes leistet. In diesem Kapitel soll die Qualität der Geschwindigkeitsschätzung untersucht werden. Die Qualität der Schätzung wird an der Größe ihrer formalen Fehler gemessen. Ebenso wird die Stabilität der Lösung, d.h. ihre Fluktuationen um den optimalen Punkt untersucht und als Qualitätskriterium herangezogen. Dabei kann sich durchaus herausstellen, dass einige Teile des Geschwindigkeitsfeldes durch das Modell gut beschrieben werden, andere wiederum schlecht bis gar nicht.

Die Qualität der Lösung hängt stark vom *a priori* Informationsstand ab. So ist zu erwarten, dass Temperatur und Salzgehalt zwischen den Gitterebenen genau bestimmt werden können, da für diese Größen Messwerte vorliegen. Die Differenz zu den Messwerten beschreibt die Abweichungen des Modellzustandes von dem gemessenen Zustand, während ihre formalen Fehler die Genauigkeit angeben, mit der der Modellzustand geschätzt werden kann. Auf der anderen Seite gibt es wenig Hoffnung, die geostrophischen Geschwindigkeiten tangential zum hydrographischen Schnitt genau zu bestimmen, da weder der Gradient des Dichtefeldes normal zum Schnitt noch die tangentialen Referenzgeschwindigkeiten aus Messungen bekannt sind. Ferner ist von vorneherein nicht eindeutig, welche Messungen zusammen mit den Modellannahmen nötig sind, um integrale Größen wie Massentransporte durch den Schnitt genau bestimmen zu können. Ebensowenig ist *a priori* klar, welche zusätzlichen Messungen bzw. Annahmen die Stabilität der Lösung verbessern.

Stabilität und *a posteriori* Fehler sind Funktionen der Hessematrix der Kostenfunktion (siehe Abschnitt 2.4). Gibt es nicht genügend Messungen oder *a priori* Annahmen, so dass die Kostenfunktion kein ausgeprägtes Minimum hat, kann die Hessematrix nahezu singulär sein. Wenn das Spektrum der Hessematrix mit einem numerischen Algorithmus berechnet wird (in diesem Kapitel die Funktion eig von MATLAB[®]), stellt sich die Frage nach einem Kriterium, das eine echte Singularität von numerischer Ungenauigkeit unterscheidet. Hier wird folgender Weg gewählt: Die Hessematrix wird im optimalen Punkt durch ihre Linearisierung approximiert (siehe Abschnitt 2.4), die *per definitionem* quadratisch und nicht-negativ ist. Wenn bei einer Eigenwertzerlegung dennoch negative Eigenwerte auftreten, deren Betrag sehr viel kleiner ist als der größte Eigenwert des Spektrums, dann werden diese als Ergebnis numerischer Ungenauigkeit interpretiert. In diesem Fall erhalten alle Eigenwerte den Wert null, die kleiner sind als der Betrag des kleinsten ("negativsten") Eigenwerts.

4.2 Sensitivitätsstudie

Die Untersuchung der im letzten Abschnitt 4.1 aufgeworfenen Fragen wird anhand eines kleinen Datensatzes durchgeführt, der es erlaubt, alle relevanten Größen schnell und ohne größeren technischen Aufwand zu berechnen. Gleichzeitig können Faktoren vermieden werden, die das System zusätzlich kompliziert machen, wie zum Beispiel eine stark unregelmäßige Verteilung der Messpunkte oder Datenlücken.

4.2.1 Datensatz und Versuchsaufbau

Der Datensatz besteht aus einer kleinen Untermenge eines echten hydrographischen Schnittes, dem WOCE SR3 Schnitt südlich von Australien, von Tasmanien quer über den südlichen Ozean bis auf den antarktischen Schelf (siehe auch Kapitel 6). Aus den ursprünglich 54 Stationen der Realisierung dieses Schnittes vom Januar 1995 (Rosenberg *et al.*, 1995b) wurden sechs ausgewählt und von diesen nur Messungen an fünf Tiefen verwendet (siehe Abb. 4.1). Diese $6 \times 5 - 1 = 29$ Messpunkte sollen als eine grobe Messung des hydrographischen Zustands entlang des Schnittes aufgefasst werden. Wenn man sich auf Temperatur und Salzgehalt beschränkt, beläuft sich die Zahl der unabhängigen Variablen des Modells auf 131, so dass hier ohne größeren technischen Aufwand die Hessematrix des Problems analysiert und zur Bewertung der Lösung herangezogen werden kann.

Bei dieser Reihe von Experimenten kommt es nicht darauf an, bestimmte hydrographische oder dynamische Felder gemäß einer "Wirklichkeit" zu reproduzieren. Stattdessen soll die Qualität der Lösung an ihrer Stabilität gemessen werden und an dem Maß der Genauigkeit, mit welcher die Observablen des Systems (Temperatur, Salzgehalt, Geschwindigkeitsfeld, integrierte Transporte) bestimmt werden können. Dennoch sollen sich die Ergebnisse der einzelnen Experimente nicht zu sehr voneinander unterscheiden, da aufgrund der Nichtlinearität der Modellgleichungen Stabilität und Fehler bis zu einem gewissen Grad von der Lösung selbst abhängen.

Wie in Abschnitt 4.1 angedeutet, hängt die Qualität der Lösung von den vorhandenen Informationen über den tatsächlichen Zustand des Ozeans entlang des Schnittes ab. Es ist intuitiv klar, dass sich die Zustandsgrößen des Systems umso genauer bestimmen lassen, je mehr Daten zur Verfügung stehen und je mehr man über das System



Abb. 4.1: Messpunkte des vollständigen Datensatzes und ausgewählte Messpunkte. Unterlegt ist die Verteilung der potentiellen Dichte σ_0 relativ zur Oberfläche, die sich aus den Messungen von Temperatur und Salzgehalt ergibt.

weiß oder zu wissen glaubt. Nun soll vorgeführt werden, welche Größen bzw. wieviele der Eigenschaften des Ozeanzustands als bekannt vorausgesetzt werden müssen, um zuverlässige Schätzungen für nicht gemessene Größen wie absolute Geschwindigkeiten oder integrierte Temperatur- und Volumentransporte angeben zu können. Dazu werden zunächst Daten und andere *a priori* Informationen zurückgehalten, indem von der Kostenfunktion (2.34) aus Abschnitt 2.5 nur einzelne Terme verwendet werden. Aus diesen Termen wird die Kostenfunktion dann Stück für Stück aufgebaut. Die Tabellen 4.1 und 4.2 geben eine Übersicht über die folgenden Versuche und die darin verwendeten Kostenfunktionen.

4.2.2 Schätzungen aus *in situ* hydrographischen Daten

Erste Schätzung vor der Minimierung

Die Kostenfunktion ist in den unabhängigen Variablen nichtlinear, deshalb kann das Ergebnis der Minimierung davon abhängen, von welchem Punkt des Phasenraumes der Kostenfunktion der Minimierungsalgorithmus gestartet wird. Folglich sollte dieser Punkt möglichst dicht am Minimum der Kostenfunktion gewählt werden, um zu gewährleisten, dass der Algorithmus in einem globalen Minimum konvergiert (Thacker, 1989).

In allen Experimenten wird der Minimierungsalgorithmus von demselben Punkt gestartet. Um diese erste Schätzung zu erhalten, werden folgende Annahmen gemacht:

• Der Mittelwert von Temperatur und Salzgehalt zwischen den beiden Gittere-

in Abschnitt 4.2.2:								
HYD01	nur hydrographische "Messungen" von Temperatur und							
	Salzgehalt							
HYD02	wie HYD01, aber mit anderem (sinnlosen) Anfangszustand							
GLATT01	Glattheit aller Felder als zusätzliche Nebenbedingung							
GLATT02	größeres Gewicht auf der Glattheitsbedingung							
VMOOR01	eine "Verankerungsmessung" der Geschwindigkeit ("current							
	mooring")							
VMOOR02	wie VMOOR01, jedoch mit größerem Gewicht auf der Glatt-							
	heitsbedingung							
VADCP	"ADCP-Messungen" der Geschwindigkeit							
VCOMBI	Geschwindigkeit aus "ADCP- und Verankerungsmessun-							
	gen"							
in Abschnitt 4.2.3:								
VREF	a priori Schätzung der Referenzgeschwindigkeit							
GRAD01	a priori Schätzung der Normalgradienten von Temperatu							
	und Salzgehalt aus einen klimatologischen Atlas, schwache							
	Gewichtung							
GRAD02	wie GRAD01, jedoch mit stärkerer Gewichtung							
BGRD	Schätzungen aus VREF und GRAD01 als Hintergrun							
	("background")							
VBGRD	wie BGRD, jedoch mit "Geschwindigkeitsmessungen" au							
	VCOMBI							
in Abschnitt 4.2.4:								
SSH	wie VBGRD, mit "Messung" der Oberflächenauslenkung							

Tab. 4.1: Kurzbeschreibung der Experimente dieses Kapitels.

benen wird durch die *in situ* Messung bestimmt, die Werte der unabhängigen Temperatur- und Salzgehaltsvariablen auf den Gitterebenen aus diesem Wert und einem klimatologischen Gradienten. Dieser Gradient berechnet sich aus finiten Differenzen der WOCE SAC Klimatologie (Gouretski und Jancke, 1998), die auf das Modellgitter bilinear interpoliert werden. An drei Positionen am Fuße des antarktischen Schelfs müsste der Gradient aufgrund fehlender klimatologischer Daten extrapoliert werden. Stattdessen wird er auf null gesetzt.

- Die absoluten Geschwindigkeiten \mathbf{u}_{ref} werden am Boden auf null geschätzt.
- q_{-H} wird so gewählt, dass w(-H) = 0 ist, also $q_{-H} = -\mathbf{u}_{ref} \cdot \nabla H$.

Das sich aus dieser Wahl ergebende Geschwindigkeitsfeld ist in Abb. 4.2 links dargestellt. Deutlich ist der Antarktische Zirkumpolarstrom (ACC) mit maximalen

Exp.	\mathcal{J}_0	\mathcal{J}_S	$\mathcal{J}_{\mathbf{u}}$	$\mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}}$	$\mathcal{J}_{\partial_u C}$	\mathcal{J}_{ζ}	C	$\delta^2 / \#(\epsilon_k = 0)$	$\phi_V [{ m Sv}]$	ϕ_{θ} [PW]
HYD01	1	Ø	Ø	Ø	Ø	Ø	∞	(26)	$140\pm590^*$	$2.3\pm6.3^*$
HYD02	1	Ø	Ø	Ø	Ø	Ø	∞	(26)	$-430\pm590^*$	$-3.8\pm6.3^*$
GLATT01	1	1	Ø	Ø	Ø	Ø	∞	(3)	$130\pm410^*$	$2.2\pm5.1^*$
GLATT02	1	10^{2}	Ø	Ø	Ø	Ø	∞	(1)	$150\pm170^*$	$2.9\pm2.0^*$
VMOOR01	1	1	1	Ø	Ø	Ø	∞	(6)	$130\pm310^*$	$2.2\pm2.6^*$
VMOOR02	1	10^{2}	1	Ø	Ø	Ø	∞	(2)	$150 \pm 76^{*}$	$2.8\pm1.7^*$
VADCP	1	1	1	1	Ø	Ø	3×10^6	34465	130 ± 140	2.2 ± 1.6
VCOMBI	1	1	1	1	Ø	Ø	6×10^4	3380	130 ± 140	2.2 ± 1.5
VREF	1	1	Ø	1	Ø	Ø	10^{6}	8852	130 ± 110	2.3 ± 1.5
GRAD01	1	1	Ø	Ø	10^{-2}	Ø	6×10^6	30412	200 ± 840	3.1 ± 12
GRAD02	1	1	Ø	Ø	1	Ø	5×10^6	19878	180 ± 730	2.8 ± 8.7
BGRD	1	1	Ø	1	1	Ø	5×10^4	762	130 ± 110	2.2 ± 1.5
VBGRD	1	1	1	1	1	Ø	5×10^4	648	130 ± 73	2.2 ± 0.96
SSH	1	1	1	1	1	1	5×10^4	640	110 ± 43	1.9 ± 0.61

Tab. 4.2: Übersicht über die verwendeten Kostenfunktionen. Es sind $\mathcal{J}_0 = \mathcal{J}_C + \mathcal{J}_\tau + \mathcal{J}_{-H} + \mathcal{J}_q$, und $\mathcal{J}_S = \mathcal{J}_{\hat{S}C} + \mathcal{J}_{\hat{S}q} + \mathcal{J}_{\hat{S}u}$. Die Bedeutung der übrigen Symbole ist in Abschnitt 2.5, Gleichung (2.34) ff. erklärt. Die Konditionszahl $C = \epsilon_{max}/\epsilon_{min}$ der Hessematrizen ist der Stabilität δ^2 gegenübergestellt. Wenn $C = \infty$, dann ist auch $\delta^2 = \infty$ und in ihrer Spalte steht (in Klammern) die Zahl der Eigenwerte, die 0 sind. Die Fehler der geschätzten Transporte von Volumen- und Temperatur wurden gemäß (2.17) bzw. (2.20) berechnet. Die mit * versehenen Fehlerschätzungen der Volumen- und Temperaturtransporte ϕ_V und ϕ_θ beziehen sich nur auf den Teil der Hessematrix, für den $\epsilon_k > 0$.



Abb. 4.2: Erste Schätzung des dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeldes von HYD01 (links) und HYD02 (rechts) vor der Minimierung der Kostenfunktion. Konturintervall der durchgezogenen Linien ist 5 cm/s, der gestrichelten Linien 2.5 cm/s. Die positive Normalgeschwindigkeit v weist aus der Blattebene heraus nach Osten, negative Normalgeschwindigkeit ist grau schattiert. Die "Strömungsfahnen" geben ein qualitatives Bild der Tangentialgeschwindigkeit.

Strömungsgeschwindigkeiten von beinahe 30 cm/s zu erkennen, den der Schnitt nahezu senkrecht schneidet. Die Geschwindigkeit parallel zum Schnitt (u) ist hier ausschliesslich durch das klimatologische Dichtefeld bestimmt. Demzufolge ist sie klein und weist nur wenig räumliche Struktur auf. Die Vertikalgeschwindigkeit erfüllt die Bodenrandbedingung w(-H) = 0 exakt und kann deshalb nicht gleichzeitig bei einer beliebigen Dichteverteilung die Oberflächenrandbedingung erfüllen. Der integrierte Volumentransport durch die gesamte Fläche beträgt 140 Sv. Trotz der groben Auflösung des Modells stimmt dieser Wert erstaunlich gut mit den Schätzungen anderer Autoren (z.B. Whitworth und Peterson, 1985; Rintoul, 1991; Sloyan, 1997) überein.

Hydrographie allein (HYD01, HYD02)

In einem ersten Inversionsexperiment besteht die Kostenfunktion nur aus dem Datenterm für Salzgehalt und Temperatur und den "weichen" Nebenbedingungen. Die Geschwindigkeit normal zum Schnitt v hat sich bei der Minimierung der Kostenfunktion nicht geändert (Abb. 4.3). Die beiden übrigen Geschwindigkeitskomponenten haben sich allerdings völlig neu eingestellt, so dass im schmalen ACC eine Subduktion von kälterem, salzärmerem Wasser zu erkennen ist, wie sie auch an dieser Stelle erwartet wird (siehe z.B. Dietrich *et al.*, 1975). Die Tangentialgeschwindigkeit u lässt sich jedoch keinem beobachteten Phänomen zuordnen.

Nun werden die formalen Fehler zur Bewertung der Lösung herangezogen. Aus der Kostenfunktion \mathcal{J}_0 ergeben sich für die 131 unabhängigen Variablen 58 Datengleichungen, jeweils 5 Gleichungen aus den Nebenbedingungen für die Randbedingungen q_{τ} und q_{-H} der vertikalen Geschwindigkeit und 2 × 19 Gleichungen aus der Forderung nach advektiver Spurenstoffbalance; also insgesamt nur 106 Gleichungen für 131 Variablen. Damit ist das Problem unterbestimmt und die Hessematrix der Kostenfunktion im Minimum mit nur 106 positiven Eigenwerten singulär. Die zu den singulären Eigenwerten gehörenden Linearkombinationen der unabhängigen Variablen sind un-



Abb. 4.3: Geschwindigkeitsfelder der Sensitivitätsstudie. Konturintervall ist 2.5 cm. Die positive Normalgeschwindigkeit v weist aus der Blattebene heraus nach Osten, westwärtige (negative) Normalgeschwindigkeit ist grau schraffiert. Die "Strömungsfahnen" geben ein qualitatives Bild der Tangentialgeschwindigkeit.

bestimmt und haben einen unendlich großen formalen Fehler. Die in Tab. 4.2 angegebenen Fehler für Volumen- und Temperaturtransport beziehen sich nur auf den Anteil der Observablen, der aus Linearkombinationen der unabhängigen Variablen besteht, denen positive Eigenwerte zugeordnet sind.

Die Källén-Lehmann Spektralfunktionen (Abb. 4.4) für Volumen- und Temperaturtransport sind für sehr kleine Eigenwerte nicht null. Damit lassen sie erkennen, dass die unbestimmten Linearkombinationen der unabhängigen Variablen zum Fehler der Transporte beitragen. Die Transporte sind deshalb formal unendlich groß. Der von Daten und Modellgleichungen bestimmbare Anteil des Transports hat aber allein schon unakzeptable Fehler von 500%.

Das bedeutet, dass die Lösung trotz aller Plausibilität wertlos ist, da sie uns zwar einen Eindruck über den Zustand des Ozeans entlang des Schnittes vermittelt, dieser aber gleichwertig mit anderen Zuständen des Systems ist. Um dies zu verdeutlichen, wird die Minimierung von einer willkürlich veränderten ersten Schätzung mit einer Bodengeschwindigkeit von -25 cm/s gestartet (Abb. 4.2 rechts). Der dazugehörige Zustand ist ozeanographisch völlig unsinnig. Das Geschwindigkeitsfeld im optimalen Punkt widerspricht ebenfalls allen ozeanographischen Erfahrungen (Abb. 4.3). Zwar ist die geostrophische Scherung bei 52°S noch deutlich zu erkennen, aber die Bodengeschwindigkeiten stellen sich so ein, dass der Nettovolumentransport -430 Sv nach Westen beträgt. Man beachte, dass dies innerhalb der (unendlichen) Fehlerbalken, selbst innerhalb des Fehlers von 590 Sv des aufgelösten Anteils des Systems ein zu akzeptierendes Ergebnis ist.

Glattheit als Zusatzbedingung (GLATT01 und GLATT02)

In den Experimenten GLATT01 und GLATT02 wird die Kostenfunktion um Regularisierungsterme erweitert, die kleiner werden, wenn sich die lokale Krümmung der modellierten Felder reduziert. Dabei sind die Gewichte der Terme in GLATT01 so berechnet, wie in Abschnitt 2.5 beschrieben. Die Lösung des Experiments GLATT01 zeigt einen ACC, der breiter ist als bei der ersten Schätzung und geringere Maximalgeschwindigkeiten (O(20 cm/s)) aufweist. Das horizontale Geschwindigkeitsfeld ist also "glatter". Durch um 100 erhöhte Gewichte des Terms \mathcal{J}_S erhält man in GLATT02 noch glattere hydrographische und dynamische Felder (Abb. 4.3). Ein über 10 Breitengrade ausgebreiteter ACC entspricht aber nicht den Beobachtungen. Auf der anderen Seite kann man einen auf diese Weise erhaltenen Zustand als Schätzung eines großskaligen und langzeitlichen Mittelwertes auffassen.

Durch die Glattheitsforderung wird auch die Zahl der nullwertigen Eigenwerte der Hessematrix auf 3 in GLATT01 (1 in GLATT02) reduziert, die Singularität der Hessematrix aber trotz der zusätzlichen 154 Gleichungen nicht aufgehoben. Mit weiterer Anhebung der Gewichte bis zum Grenzfall von unendlichen großen Gewichten für \mathcal{J}_S würde durch die Annahme homogener (unendlich glatter) Felder die Bestimmbarkeit einzelner Linearkombinationen der unabhängigen Variablen auf alle Variablen "verteilt". Die Transportfehler ohne den Beitrag der unbestimmbaren Anteile lassen sich



Abb. 4.4: Källén-Lehmann Spektralfunktionen der Hessematrix (durchgezogene), des Volumen- (gestrichelte) und des Temperaturtransports (gepunktete Linie) für die Experimente der Sensitivitätsstudie.

durch entsprechend stark gewichtete Glattheitsforderungen um mehr als den Faktor drei reduzieren (GLATT02). Der Gesamtfehler ist aber immer noch unendlich, da hier die unbestimmten Linearkombinationen der unabhängigen Variablen beitragen. Diese ist daraus abzulesen, dass die Spektralfunktionen für sehr kleine Eigenwerte nicht null sind (Abb. 4.4).

Glattheit mit einer Geschwindigkeitsmessung (VMOOR01 und VMOOR02)

Die Kostenfunktion aus den Experimenten GLATT01 und GLATT02 wird nun um eine Messung der absoluten horizontalen Geschwindigkeit $\mathbf{u} = (u, v)$ im Bereich des ACC erweitert. Diese Messung, ein Wert aus der Lösung von GLATT01, um das Geschwindigkeitsfeld nicht zusätzlich zu verzerren, simuliert eine Verankerungsmessung der absoluten horizontalen Geschwindigkeit mit hoher Messgenauigkeit von 2 cm/s. Die Konfiguration der Experimente VMOOR01 und VMOOR02 entspricht der Situation in Yaremchuk *et al.* (1998) und Yaremchuk *et al.* (2000b), bei der nur vereinzelte Messungen der Geschwindigkeit zur Verfügung stehen. Aufgrund der Wahl des Messwertes unterscheiden sich die Geschwindigkeitsfelder der Lösungen von VMOOR01 und VMOOR02 nicht von ihren Entsprechungen aus GLATT01 und GLATT02.

Auch die Messung kann die Singularität der Hessematrix der Kostenfunktion $\mathcal{J}_0 + \mathcal{J}_u + \mathcal{J}_S$ nicht aufheben. Die unbestimmbaren Linearkombinationen der unabhängigen Variablen tragen laut der Källén-Lehmann Spektralfunktionen (Abb. 4.4) zu den Fehlern des integrierten Volumen- und Temperaturtransports bei, so dass zu den besonders für VMOOR02 kleinen Fehlern in Tabelle 4.2 noch ein unendlicher Anteil dazugeschlagen werden muss. Die Lösungen sind auch nach wie vor instabil ($\delta^2 = \infty$). Es sind also weitere Messungen oder Annahmen nötig.

Glattheit mit ADCP Geschwindigkeitsmessungen (VADCP)

Das Experiment VMOOR01/VMOOR02 hat gezeigt, dass eine genaue Messung der absoluten Geschwindigkeit an nur einem Punkt, zusammen mit moderater bis starker Glattheitsbedingung nicht ausreicht, um das Geschwindigkeitsfeld normal zum Schnitt eindeutig zu bestimmen. Verankerungsmessungen können aber nur selten mit der nötigen räumlichen Auflösung durchgeführt werden. Eine weitere naheliegende Möglichkeit der Geschwindigkeitsmessung liefert ein "Acoustic Doppler Current Profiler" (ADCP), das auf dem Schiff mitgeführt wird. Dieses Gerät misst mit Hilfe des Dopplereffekts das Geschwindigkeitsprofil relativ zur Schiffsbewegung von der Oberfläche bis etwa 400 m Wassertiefe. Zusammen mit einer genauen Positionsbestimmung des Schiffs und geeigneter (Roh-)Datenverarbeitung, zum Beispiel Elimination des Gezeitensignals, horizontale und/oder vertikale Mittelung, lässt sich die oberflächennahe absolute horizontale Geschwindigkeit entlang des gesamten Schnittes bis auf 4– 6 cm/s genau angeben (Bersch, 1995).

In diesem Experiment VADCP werden solche ADCP Geschwindigkeitsmessungen entlang des Schnittes simuliert, indem die Normalgeschwindigkeit v der Lösung

GLATT01 und die horizontale Tangentialgeschwindigkeit *u* der ersten Schätzung, d.h. die geostrophische Geschwindigkeit relativ zum Boden aus der Klimatologie, als Daten verwendet werden. Letztere wird derjenigen der Lösung von GLATT01 vorgezogen, weil sie der ozeanographischen Erfahrung besser entspricht als die im instabilen Fall GLATT01 gefundene Tangentialgeschwindigkeit. Im Hinblick auf ein späteres Experiment (E10), das die erste Schätzung als Ganzes berücksichtigt, führt diese Wahl der "Daten" zu einem mit den übrigen Experimenten vergleichbaren Ergebnis. Beide Geschwindigkeitskomponenten sollen jeweils mit einem Fehler von 4 cm/s behaftet sein. Damit gelten für dieses Experiment ähnliche Voraussetzungen wie bei Nechaev und Yaremchuk (1995), die ebenfalls ADCP-Geschwindigkeitsmessungen zur Verfügung hatten.

Das Geschwindigkeitsfeld dieser Lösung passt sich an der Oberfläche eng an die "Daten" an. Volumen- und Temperaturtransport sind gegenüber GLATT01 oder VMOOR01 kaum verändert. Jedoch zeigt sich, dass die Hessematrix im Minimum der Kostenfunktion nicht singulär ist, so dass hier eine zuverlässige Angabe von Fehlern der Observablen möglich ist. Für die integrierten Transporte haben die formalen Fehler die Größenordnung der Transporte selbst. Die drastische Implikation dieses Ergebnisses lautet: Es lassen sich mit ADCP-Geschwindigkeitsmessungen dieser Güte ($\approx 4 \text{ cm/s}$ Fehler) allein keine eindeutigen Aussagen darüber machen, ob der Nettotransport durch diesen Schnitt mit dem starken ostwärtigen ACC wirklich nach Osten gerichtet ist. In der räumlichen Verteilung der Fehler von v erkennt man eine Zunahme von weniger als 4 cm/s nahe der Oberfläche auf beinahe doppelt so große Werte in der Tiefe (Abb. 4.5). Die Fehler von u (Abb. 4.6) vergrößern sich in der Tiefe auf das beinahe 20-fache ihrer Größe nahe der Oberfläche (4 cm/s). Die Fehlerverteilung von w (Abb. 4.7) weist eine ähnlich Struktur auf wie die von v, die Größenordnung ist aber eher vergleichbar mit den über 1000%-igen Fehlern von u.

VCOMBI

Die Verwendung beider Geschwindigkeitsmessungen aus VMOOR01 und VADCP führt nur zu einer kleinen Reduktion der *a posteriori* Fehler für Volumen- und Temperaturtransport gegenüber Experiment VADCP (Tab. 4.2). Die Tangentialgeschwindigkeitskomponenten *u* und *w* lassen sich auch nur geringfügig besser bestimmen. Wie schon in Experiment VMOOR01/VMOOR02 genügt auch hier eine einzelne Geschwindigkeitsmessung nicht, um eine deutliche Verbesserung der geschätzten Transporte und Geschwindigkeiten zu erzielen.

4.2.3 Zusätzliche a priori Daten/Informationen

Referenzgeschwindigkeiten (VREF)

Nach der Verwendung von Messungen der absoluten Geschwindigkeit, die aufwändig und ungenau sein können, besteht die Möglichkeit, auf den Erfahrungsschatz der Ozea-



Abb. 4.5: Formale Fehler der Normalgeschwindigkeit v in cm/s.

nographie zurückzugreifen, um zusätzliche *a priori* Informationen über das Geschwindigkeitsfeld zu erhalten. Diese Erfahrung geht bereits in die erste Schätzung in Form von verschwindender horizontaler Bodengeschwindigkeit und dem klimatologischen Gradienten von Temperatur und Salzgehalt ein. So erscheint beispielsweise eine Nullschicht ("level of no motion") zwischen zwei sich in entgegengesetzter Richtung ausbreitenden Wassermassen plausibel, in der die absolute Geschwindigkeit näherungsweise verschwindet. In einem Regime wie dem ACC, in dem sich die gesamte Wassersäule in eine Richtung bewegt, ist die Annahme von kleinen Bodengeschwindigkeiten sicherlich eine gute Näherung der tatsächlichen Verhältnisse. Diese Annahme, die bei der dynamischen Methode das Ergebnis stark mitbestimmt (siehe Abschnitt 2.1), kann hier durch eine sinnvolle *a priori* Fehlerangabe von ihrem subjektiven Charakter



Abb. 4.6: Formale Fehler der horizontalen Tangentialgeschwindigkeitskomponente u in cm/s.

befreit werden.

Das Experiment VREF kommt ohne Geschwindigkeitsmessungen aus. Stattdessen wird angenommen, dass die Bodengeschwindigkeiten durch ihre erste Schätzung $(\mathbf{u}_{ref} = 0)$ bis auf ±4 cm/s richtig beschrieben sind. Angesichts der geringen absoluten Geschwindigkeiten in der Tiefe von wenigen Zentimetern pro Sekunde (siehe z.B. Dietrich *et al.*, 1975) stellt diese Annahme nur eine kleine Einschränkung dar.

Das Geschwindigkeitsfeld im Minimum der Kostenfunktion $\mathcal{J}_0 + \mathcal{J}_S + \mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}}$ unterscheidet sich bis auf eine Zunahme der Tangentialgeschwindigkeiten u nahe der Oberfläche um etwa 1–2 cm/s nach Süden kaum von GLATT01. Die Hessematrix der Kostenfunktion hat eine endliche, wenn auch große Konditionszahl von 10⁶, so dass zuverlässige Fehlerschätzungen möglich sind. Die Fehler des integrierten Volumen-



Abb. 4.7: Formale Fehler der vertikalen Tangentialgeschwindigkeitskomponente w in mm/s.

und Temperaturtransports betragen hier knapp 100%. In dieser Form lassen sich mit dem Modell also keine eindeutigen Aussagen über die Richtung des Massentransports des ACCs treffen! Die lokalen Fehler des Geschwindigkeitsfeldes haben für v ebenfalls die Größenordnung 100% und für u und w sogar 1000%. Bei der räumlichen Verteilung fällt auf, dass neben der erwarteten Abnahme der Fehler der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten mit größeren Tiefen nahe der auf 4 cm/s genau bestimmten Bodengeschwindigkeiten, die Vertikalgeschwindigkeit wie in VADCP die kleinsten Fehler nahe der Oberfläche hat. Die kleineren Fehler der horizontalen Geschwindigkeit haben hier einen kleineren Einfluss auf die Vertikalgeschwindigkeit als die Genauigkeit der Randbedingungen, die mit w(0) = 0 an der Oberfläche besser anzugeben sind als am Boden, weil dort die Bodenneigung $\nabla_h H$ schwierig zu schätzen ist (siehe dazu auch Kapitel 6). Weiter scheint die Angabe der horizontalen Bodengeschwindigkeit in Konkurrenz mit der Forderung $q_{-H} = -w(-H) - \mathbf{u}_{ref} \cdot \nabla_h H \approx 0$ zu treten, worauf die größeren Fehler von w in diesem Experiment VREF gegenüber VADCP hinweisen. Die größeren Fehler der Bodengeschwindigkeit in VADCP rühren daher, dass sie sich aus den Fehlern der oberflächennahen (ADCP) Geschwindigkeiten *und* den Fehlern des Dichtefeldes zusammensetzen. Aufgrund der größeren Fehler kann sich dort die Bodengeschwindigkeit leichter so einstellen, dass $q_{-H} \approx 0$.

Klimatologische Daten (GRAD01, GRAD02)

Klimatologische hydrographische Atlanten sind eine weitere unabhängige Informationsquelle für den hydrographischen Zustand des Ozeans. Im Allgemeinen sind in ihnen Messungen über einen bestimmten Zeitraum (z.B. die WOCE Periode 1986– 2000) integriert und dann auf eine geeignete Art über das zur Disposition stehende Gebiet interpoliert, um eine Karte der Verteilung der hydrographischen Parameter (z.B. Temperatur, Salzgehalt, Sauerstoffkonzentration) zu erhalten. Die auf diese Art gewonnene Karte der hydrographischen Parameter muss deshalb als zeitliches und räumliches Mittel betrachtet werden, von dem *in situ* Messungen der gleichen Parameter je nach Ort und Auflösung der Messung abweichen (siehe als Beispiel Abb. 4.8). Daten aus klimatologischen Atlanten sollten *a priori* Fehler zugeordnet werden, die die "erlaubten" Abweichungen des zu schätzenden Zustands vom klimatologischen Mittel beschreiben. Wenn man einen momentanen Zustand entlang des hydrographischen Schnittes schätzen möchte, sind diese Abweichungen möglicherweise groß. Wenn das Ziel der Schätzung ein langjähriges großräumiges Mittel ist, sind sie klein.

Die hier verwendete Klimatologie des WOCE Special Analysis Center (SAC) wurde durch Interpolation der hydrographischen Parameter auf neutralen Flächen gewonnen (Gouretski und Jancke, 1998). Diesem Atlas werden die Normalgradienten von Temperatur und Salzgehalt entnommen.

Zunächst wird in Experiment GRAD01 der Term $\mathcal{J}_{\partial_y C}$ mit dem Faktor 10^{-2} schwach gewichtet, da hier untersucht werden soll, welchen Einfluss Messungen des Gradienten normal zum Schnitt überhaupt auf die Lösung haben kann. In GRAD02 sind die Gewichte von $\mathcal{J}_{\partial_y C}$ wieder um den Faktor 10^2 erhöht; das entspricht einem zehnmal kleineren Fehler. Messungen oder Schätzungen der horizontalen Geschwindigkeit werden in GRAD01 und GRAD02 nicht berücksichtigt.

In beiden Fällen ist die Konditionszahl der resultierenden Hessematrix endlich, die Fehler von Volumen- und Temperaturtransport aber unverhältnismäßig groß (Tab. 4.2). Da der Normalgradient die Scherung der tangentialen geostrophischen Geschwindigkeit bestimmt, reduziert sich gegenüber den bisherigen Experimenten der lokale Fehler dieser Geschwindigkeitskomponente (Abb. 4.6) um den Faktor zwei in GRAD01 (vier in GRAD02). Gleichzeitig erhält die Tangentialgeschwindigkeit eine Verteilung, die der ersten Schätzung gleicht. Die Geschwindigkeit v normal zum Schnitt, die den Transport bestimmt, verändert sich nur geringfügig im stromarmen südlichen und tiefen Bereich des Schnittes. Dennoch wird der Transport selbst viel zu groß ($\phi_V = 200$ Sv in GRAD01; $\phi_V = 180$ Sv in GRAD02). Die Fehler der Transporte



(**b**) Temperatur [°C]

Abb. 4.8: Vergleich von Salzgehalts- und *in situ* Temperaturmessungen des WOCE SAC Atlas (durchgezogene Konturen) mit den Messungen der australischen Expedition AU9407(gepunktete Konturen). Das Konturintervall ist 0.1 PSU für Salzgehalt und 1°C für Temperatur. Die einander entsprechenden Konturen liegen eng genug beieinander, so dass nur die zum WOCE SAC Atlas gehörenden beschriftet sind. Die Differenzen zwischen den beiden Datensätzen vermitteln eine Vorstellung von den Unterschieden zwischen quasi-synoptischen Messungen und langjährigen Mittelwerten.
sind riesig. Die Messung der Normalgradienten kann zwar offenbar die mathematische Singularität des Modell aufheben, besonders wenn ihnen ein kleiner *a priori* Fehler zugeordnet ist, physikalisch sind aber die Observablen des Systems immer noch nahezu unbestimmt.

Referenzgeschwindigkeiten und klimatologische Daten (BGRD)

In Experiment BGRD werden die Kostenfunktionen aus VREF und GRAD01 zu $\mathcal{J}_{BGRD} = \mathcal{J}_0 + \mathcal{J}_S + \mathcal{J}_{\mathbf{u}_{ref}} + \mathcal{J}_{\partial_y C}$ kombiniert. Die Normalgeschwindigkeit v unterscheidet sich kaum von derjenigen aus VREF, folglich ist der Massentransport beinahe der gleiche. Die Tangentialgeschwindigkeit *u* hat nun fast die gleiche Form wie bei der ersten Schätzung. Die a posteriori Fehler von u konnten auf unter 40 cm/s reduziert werden. Diese Größenordnung entspricht allerdings immer noch einem relativen Fehler von weit über 100%. Ähnliches gilt für die Vertikalgeschwindigkeit. Die Fehler von v sind gegenüber Experiment VREF kaum verändert, so dass die Transportfehler sich ebenfalls nicht von denjenigen aus VREF unterscheiden. Die Hinzunahme der klimatologischen hydrographischen Daten für den Normalgradienten hat also wenig Einfluss auf die Schätzungen derjenigen Observablen, die explizite Funktionen der Normalgeschwindigkeit v sind. Die Bedeutung der hydrographischen Normalgradienten wird an der Reduktion der Konditionszahl der Hessematrix auf 5×10^4 und der damit einhergehenden größeren Stabilität (= kleinem δ^2) der Lösung deutlich. Diese Eigenschaft kann bei Systemen mit vielen Unbekannten $(O(10^4))$ von entscheidendem Vorteil sein, weil durch sie die Konvergenz des Minimierungsalgorithmus stark beschleunigt werden kann und auch die Fehlerschätzung erleichtert wird (siehe hierzu auch Kapitel 5 und 6).

Geschwindigkeitsmessungen zusammen mit *a priori* Schätzungen der Bodengeschwindigkeit und klimatologischen Daten (VBGRD)

In diesem Experiment werden nun alle Daten und Informationen aus den vergangenen Experimenten zusammengefasst und mit der moderaten Glattheitsforderung aus Experiment GLATT01 kombiniert.

Die Konditionszahl der Hessematrix kann gegenüber der aus Experiment BGRD nicht weiter reduziert werden, im Gegenteil, sie ist sogar leicht erhöht. Dieser Umstand lässt sich wie folgt erklären: Die Daten, die gegenüber Experiment BGRD hinzugefügt worden sind, tragen zur Bestimmung derjenigen Linearkombinationen von unabhängigen Variablen, die bereits gut bekannt sind, mehr bei als zur Bestimmung derer, die bereits vorher in Experiment BGRD auch nur ungenau zu schätzen waren (Thacker, 1989). Die *a posteriori* Fehler der integrierten Transporte nehmen aber durch die neu hinzugekommenen Daten auf etwa 60% der Werte aus BGRD ab (Tab. 4.2). Eine Reduktion der gleichen Größenordnung erfährt nicht nur die Normalkomponente der Geschwindigkeit, sondern auch die beiden Tangentialkomponenten (Abb. 4.6 und Abb. 4.7). Normalkomponente und Transporte lassen sich in diesem Experiment

bis auf etwa 50%-ige Fehler bestimmen (Abb. 4.6), während man für die Tangentialkomponenten jedoch immer noch Fehler erhält, die die geschätzten Werte um ein Vielfaches übersteigen.

4.2.4 Oberflächenauslenkung

Die absolute Geschwindigkeit an der Oberfläche kann im Prinzip aus der Oberflächenneigung über

$$fv_s = g \frac{\partial \zeta}{\partial x} \tag{4.1}$$

berechnet werden. Die Genauigkeit dieser Oberflächengeschwindigkeit ist wellenlängenabhängig. Wenn man ζ und v_s als Superposition von stehenden Wellen begreift,

$$v_{s} = \frac{g}{f} \frac{\partial \zeta}{\partial x} = \frac{g}{f} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{k} \zeta_{k} e^{i(kx + \varphi_{k})}$$
$$= \frac{g}{f} \sum_{k} k \zeta_{k} e^{ikx + i(\varphi_{k} + \pi/2)}$$
$$= \sum_{k} v_{k} e^{ikx + i(\varphi_{k} + \pi/2)},$$

erhält man aus einer einfachen Gaußschen Fehlerfortpflanzung den wellenlängenabhängigen Fehler der Oberflächengeschwindigkeit

$$\delta v_k = \frac{gk}{f} \delta \zeta_k$$
 mit Wellenzahl $k \propto \frac{1}{\lambda}$.

Für lange Wellen $(k \to 0)$ ist der Fehler von v_k selbst für große Fehler von ζ klein, während der Fehler δv_k für kurzwelliges Signal $(k \to \infty)$ sehr groß wird.

Die hydrographischen Stationen des in diesem Kapitel verwendenten Datensatzes liegen etwa 400 km auseinander. Ihre Positionen definieren ein Gitter an der Oberfläche, auf dem nur Signale mit einer minimalen Wellenlänge von 2 × 400 km = 800 km dargestellt werden können. Hätten Messungen der Oberflächenauslenkung an zwei benachbarten Stationen jeweils den Fehler $\delta\zeta = 1$ cm, dann ließe sich aus ihnen die Oberflächengeschwindigkeit v_s mit einem Fehler von $\delta v_s = g/(f\Delta x)\sqrt{2}\delta\zeta \approx$ 2 mm/s bestimmen. Bei einem realistischen Stationsabstand von 40 km betrüge dieser Fehler 2 cm/s. Allerdings sind im zweiten Fall deutlich mehr Wellenlängen in der Geschwindigkeitsinformation enthalten.

Bei der Berechnung des barotropen Transports aus Oberflächenauslenkung und Wassertiefe entsteht daraus ein scheinbarer Widerspruch. Man betrachte zwei Punkte A und B mit dem Abstand Δx (Abb. 4.9). Die Oberflächenauslenkung ζ kann an beiden Punkten mit dem Fehler $\delta \zeta$ angegeben werden. Der Fehler der Differenz $\Delta \zeta = \zeta_B - \zeta_A$ beträgt dann nach Gaußscher Fehlerfortpflanzung $\delta(\Delta \zeta) = \sqrt{2}\delta \zeta$.



Abb. 4.9: Skizze zum "Transportparadoxon".

Mögliche Korrelationen der Fehler untereinander, die zu größeren Fehlern führen können, werden hier vernachlässigt. Der relative Fehler des aus $\overline{\phi} = (g/f)\overline{D}\Delta\zeta$ berechneten Transports ist $\delta\overline{\phi}/\overline{\phi} = \delta(\Delta\zeta)/\Delta\zeta = \sqrt{2}\delta\zeta/\Delta\zeta$. \overline{D} ist eine repräsentative Tiefe zwischen den Punkten A und B. Durch eine verbesserte Messtechnik sei es nun möglich, die Oberflächenauslenkung ζ und die Tiefe D an N Punkten zwischen A und B mit dem gleichen Fehler $\delta\zeta$ anzugeben. Der Transport zwischen A und B setzt sich nun aus den Transporten zwischen dem k-ten Punktepaar zusammen: $\phi = \sum_k \phi_k = \sum_k (g/f) D_k \Delta\zeta_k$. D_k ist wieder eine repräsentative mittlere Tiefe, diesmal aber für das k-te Punktepaar. Für den formalen Fehler ergibt sich aber mit $\delta\phi = (g/f)\sqrt{\sum_k D_k^2}\sqrt{2}\delta\zeta \ge N(g/f)\overline{D}\sqrt{2}\delta\zeta = N\delta\overline{\phi}$ ein mindestens N-fach größerer Wert als für den stark vereinfachten Fall mit schlechter auflösenden Messungen. Zu dem kleinen Fehler $\delta\overline{\phi}$ muss aber noch der Beitrag hinzugezählt werden, der durch die Vereinfachung der Bodentopographie entsteht. Im Einzelnen könnte man diesen durch $\delta\overline{\phi}_{\overline{D}} = |\phi - \overline{\phi}|$ abschätzen, da der mit höherer Auflösung gewonnene Transport ϕ sicherlich die bessere Schätzung liefert.

Der große Einfluss der nun verwendeten SSH-,,Daten" auf die Fehler der Observablen ist unter diesen Gesichtspunkten zu beurteilen. Insbesondere kann ein vergleichbarer Einfluss bei realistischen Experimenten nicht erwartet werden.

Experiment SSH

Im Experiment SSH werden Messungen der Oberflächentopographie durch das Ergebnis aus GLATT01 simuliert, um eine Lösung zu erhalten, die mit den vorangegangenen vergleichbar ist. Die Daten werden im Kostenfunktionsterm \mathcal{J}_{ζ} direkt mit den Modellwerten verglichen, d.h. der Interpolationsoperator $\hat{\Phi}_{\zeta}$ aus Kapitel 3 ist die Identität. Den Messungen wird ein unkorrelierter Fehler von 10 cm zugeordnet.

Wie gewünscht unterscheidet sich das Geschwindigkeitsfeld nicht von demjenigen aus VBGRD. Die Fehler der tangentialen Geschwindigkeiten u und w können durch diese zusätzlichen Daten nicht weiter reduziert werden. Die Normalgeschwindigkeit v erfährt eine deutliche Reduktion der oberflächennahen Fehler um mehr als 1 cm/s (etwa 30%). Die Fehler der tiefen Normalgeschwindigkeit bleiben jedoch unverändert. Durch die verbesserte Schätzung der Normalgeschwindigkeit an der Oberfläche kann der Fehler des integrierten Volumen- und Temperaturtransports gegenüber VBGRD nochmal um 40% verkleinert werden. Konditionszahl und Stabilität ändern sich jedoch nur geringfügig.

4.3 Zusammenfassung

Das in Kapitel 2 vorgestellte inverse Modell wurde daraufhin untersucht, ob mit seiner Hilfe zuverlässige Schätzungen des geostrophischen Zustands entlang eines hydrographischen Schnittes möglich sind. Um den technischen Aufwand gering zu halten, wurde ein kleiner Datensatz mit sechs Stationen und fünf Tiefenschichten verwendet.

Im Verlauf der Sensitivitätsexperimente stellte sich heraus, dass eine Modellkonfiguration wie die des Vorgängermodells in Yaremchuk et al. (1998) und Yaremchuk et al. (2000b) unendlich große formale Fehler des geschätzten Geschwindigkeitsfeldes und der daraus berechneten integrierten Transporte zur Folge hat (HYD01 bis VMOOR02). Lösung sowie Fehlerrechnung bestehen in diesen Fällen aus Elementen eines Unterraumes des Lösungsraumes, der von den Eigenvektoren der Hessematrix aufgespannt wird, deren Eigenvektoren größer als 0 sind. Der Beitrag des Nullraumes des Problems (Eigenwerte = 0) kann nicht berücksichtigt werden. Zusätzliche Messungen wie in VADCP oder bei Nechaev und Yaremchuk (1995) oder aber a priori Schätzungen der absoluten Geschwindigkeit wie in VREF sind notwendig, um die Singularität des Problems aufzuheben. Das Gleiche ist möglich, wenn man a priori Schätzungen der Normalgradienten von Temperatur und Salzgehalt verwendet. Dieser Datentyp erwies sich aber als ungenügend, um Transportschätzungen zu verbessern (GRAD02). Verwendet man diese Schätzungen zusätzlich zu Schätzungen der absoluten Geschwindigkeiten, verbessern sich die a posteriori Schätzungen der Normalgeschwindigkeit und damit der integrierten Transporte zwar nicht weiter, aber die Konditionszahl der Hessematrix der Kostenfunktion wird stark reduziert. Dies führt auch zu einem verbesserten Konvergenzverhalten des Minimierungsalgorithmus (Thacker, 1989).

Die Verwendung zusätzlicher Messungen von Geschwindigkeit und Oberflächentopographie hat auf die Konditionszahl und die Stabilität des Problems nur einen kleinen Einfluss, kann aber die Fehler des Geschwindigkeitsfeldes und der Transporte deutlich verkleinern.

Im Hinblick auf die folgenden Kapitel, in denen Modellkonfigurationen mit deut-

lich mehr unabhängigen Variablen verwendet werden $(O(10^4))$, genügt es nicht, die Lösung des inversen Modells anhand ihrer Plausibilität und Übereinstimmung mit Messungen zu beurteilen. Zusätzlich müssen wenigstens die Stabilität der Lösung und das Spektrum der Hessematrix berücksichtigt werden. Die damit mögliche Fehlerrechnung gibt schließlich Aufschluss über die Zuverlässigkeit der Modellschätzung. Insbesondere muss man zusätzliche Annahmen über denjenigen Teil der Lösung heranziehen, den das Modell aus Messungen allein nur ungenügend oder gar nicht schätzen kann. Mit Hilfe dieser Annahmen kann man die mathematische Singularität in einer mit *a priori* Fehlerschätzungen konsistenten Weise aufheben.

Kapitel 5

Test des inversen Modells an einem synthetischen Datensatz

5.1 Modellvalidierung/Modelltest

Auf die Entwicklung eines Modells folgt die Überprüfung seiner Ergebnisse auf Plausibilität und Zuverlässigkeit. Zum Teil ist dies bereits in Kapitel 4 geschehen. Dort wurde gezeigt, dass Konvergenz in ein ausgeprägtes Minimum und eine anschliessende Fehlerrechnung nur dann möglich sind, wenn ausreichend Daten des Geschwindigkeitsfeldes vorhanden sind oder entsprechende *a priori* Annahmen über den zu schätzenden Zustand gemacht werden.

Jetzt soll untersucht werden, ob ein vom inversen Modell geschätzter Zustand innerhalb seiner *a priori* und formalen Fehler mit dem tatsächlichen Zustand übereinstimmt. Dazu bedient man sich üblicherweise sogenannter Zwillingsexperimente, bei denen aus einem bekannten Zustand "Daten" ausgewählt werden, anhand derer das inverse Modell versucht, diesen Zustand zu reproduzieren.

Da das inverse Modell keine Zeitabhängigkeit enthält, können nur stationäre Zustände geschätzt werden. Die naheliegende Anwendung eines solchen stationären Modells besteht in der Schätzung eines mittleren Zustands aus einer Messung des Dichtefeldes und passiver Spurenstoffe. Zum Test des Modells unter diesem Gesichtspunkt werden aus einer Zeitserie von Zuständen eines Modells der allgemeinen Ozeanzirkulation zeitliche Mittelwerte gewonnen. Ein Zustand des Zirkulationsmodells zu einem Zeitpunkt wird als synoptische "Messung" angesehen. Die Schätzung eines stationären Zustands aus dieser Momentaufnahme des Dichtefeldes durch das inverse Modell muss dem Vergleich mit dem mittleren Zustand des Zirkulationsmodells standhalten.

Zusätzlich zu *in situ* Messungen von Dichte und Geschwindigkeit können Messungen der Oberflächenauslenkung zur Schätzung des Geschwindigkeitsfeldes herangezogen werden. Dabei ist von besonderem Interesse, welchen Einfluss Genauigkeit und Auflösung dieser Oberflächendaten auf die Schätzung haben. Um diesen Einfluss zu erfassen, wird die Oberflächenauslenkung in der Kostenfunktion mit der Inversen von verschiedenen Kovarianzmatrizen gewichtet, die Auflösung und Genauigkeit der Geoidmodelle EGM96, GRACE und GOCE beschreiben.

An dieser Stelle sei vermerkt, dass es prinzipiell nicht möglich ist, ein Modell, insbesondere ein numerisches Modell, wirklich zu verifizieren (Oreskes *et al.*, 1994). Stattdessen kann man nur Aussagen darüber machen, ob das Modell zu Ergebnissen kommt, die mit seinen *a priori* Annahmen konsistent sind. Ist dies nicht der Fall, muss das Modell modifiziert oder gar verworfen werden (Wunsch, 1996).

5.2 Datensatz: (1/3)° Nordatlantikmodell

Zur Validierung des in Kapitel 2 vorgestellten inversen Modells sollen Zwillingsexperimente mit einem Datensatz durchgeführt werden, der durch die Integration des (1/3)° Nordatlantikmodells der FLAME-Gruppe gewonnen worden ist (Redler *et al.*, 1998). Der Programmcode für dieses Modell der allgemeinen Ozeanzirkulation (OGCM) ist eine Weiterentwicklung von MOM2 (Modular Ocean Model, Version 2, Pacanowski, 1995) für massiv parallele Rechnerarchitekturen.

Das Modellgebiet des $(1/3)^{\circ}$ Nordatlantikmodells der FLAME-Gruppe erstreckt sich von 18°S bis 70°N im Atlantischen Ozean und hat eine Auflösung von $(1/3)^{\circ}$ in meridionaler und $(1/3)^{\circ}\cos\phi$ (ϕ ist die geographische Breite) in zonaler Richtung. Die 45 vertikalen Schichten des Modells haben an der Oberfläche einen Abstand von 10 m zueinander. Dieser Abstand vergrößert sich langsam bis auf 250 m unterhalb von 2250 m. Das Modell wird an der Oberfläche durch Monatsmittelwerte von ECMWF Reanalysedaten für Windschubspannung, Wärme- und Süßwasserflüsse angetrieben (Barnier *et al.*, 1995).

Die Integration des Modells startet von einem Anfangszustand, der auf Monatsund Jahresmittelwerten von potentieller Temperatur und Salzgehalt nach Levitus *et al.* (1994), Levitus und Boyer (1994) und Boyer und Levitus (1997) basiert. Nach einem Einschwingvorgang von 10 Modelljahren werden Temperatur, Salzgehalt und das dreidimensionale Geschwindigkeitsfeld in dreitägigen Abständen gespeichert; ebenso Dreitagesmittel der Oberflächenauslenkung, die aus dem Geschwindigkeitsfeld abgeleitet wird.

Mit seiner hohen räumlichen Auflösung und den repräsentierten physikalischen Prozessen kann das Modell der FLAME-Gruppe ein breites Spektrum an Bewegungen entwickeln. Dadurch qualifiziert es sich als Abbild einer "Realität". Inwieweit das Modell die Zirkulation des tatsächlichen Ozeans simuliert, soll hier nicht im Einzelnen beurteilt werden. Allerdings darf man bei dem Versuch, das Geschwindigkeitsfeld des FLAME-Modells mit dem inversen Modell dieser Arbeit zu rekonstruieren, nicht die Tatsache außer Acht lassen, dass sich zwar die Physik der beiden Modelle unterscheidet und man daher eine perfekte Übereinstimmung nicht erwarten kann, dass aber dieser Unterschied ein anderer ist als derjenige zwischen der Physik des echten Ozeans und des inversen Modells. Dabei ist unklar, was das inverse Modell besser schätzen kann: einen echten Ozeanzustand oder einen Zustand des FLAME-Modellozeans. Eine Überprüfung des inversen Modells anhand des FLAME-Modells kann deshalb nur eingeschränkt für andere Anwendungen des inversen Modells gültig sein.

Der hier verwendete Datensatz besteht aus einer einjährigen Zeitserie der dreitägigen Momentaufnahmen des FLAME-Modellzustandes im elften Modelljahr. Entlang 24°30'N, also etwa entlang des hydrographischen WOCE Schnitts A5 (Bryden et al., 1996), wird ein Schnitt von der Südspitze Floridas bis zur Küste Afrikas südlich der Kanarischen Inseln gelegt. Die Stationsabstände dieses Schnittes, im Folgenden der Kürze halber 24°N genannt, sind ebenfalls dem WOCE Schnitt A5 nachempfunden. Sie betragen im offenen Ozean 1° geographische Länge und verkleinern sich nach Westen bis auf (1/3)°, der besten Auflösung des FLAME-Datensatzes, weil man hier die dynamisch interessante Floridastraße besser auflösen möchte. Nach bilinearer Interpolation von Temperatur, Salzgehalt und Geschwindigkeit auf das Gitter des inversen Modells entlang dieses Schnittes (siehe Abb. 2.2) beträgt der mittlere Volumentransport durch den Schnitt im elften Modelljahr $\phi_V = -0.2$ Sv. Dieses Jahresmittel hat eine Standardabweichung von 0.3 Sv. Der Temperaturtransport relativ zu 0°C beträgt $\phi_{\theta} = 0.74 \pm 0.13$ PW. Das ist weniger als die Schätzungen des Temperaturtransports von 1.1 bis 1.3 PW über den realen Schnitt im Nordatlantik durch Roemmich und Wunsch (1985), Bryden (1993) und Macdonald und Wunsch (1996). Zur Illustration der räumlichen Bewegungsskalen, die das FLAME-Modell enthält, und in Hinblick auf die nächsten Abschnitte, zeigt Abb. 5.1 die zeitlichen Mittel der räumlichen Fourier Leistungsspektren der Oberflächenauslenkung und der vertikal integrierten Transporte von Volumen und Temperatur. Ein großer Anteil aller drei Signale liegt im Wellenlängenbereich von 200 bis 500 km. Dieser spektrale Bereich liegt unterhalb der Längenskala, die gegenwärtig von Oberflächendaten zuverlässig aufgelöst werden können (EGM96). Mit einem zukünftigen Geoidmodell aus der GOCE Mission (siehe Kapitel 3) könnten diese Skalen aber beschrieben werden. Die Spektren fallen unterhalb von 200 km stark ab. Wie von Böning und Budich (1992) bemerkt, ist das etwa die Längenskala, bei der in einem $(1/3)^{\circ}$ Modell mit biharmonischer Parametrisierung der horizontalen Vermischung die Diffusion zum dominierenden Prozess wird. Das hat zur Folge, dass in diesem kurzwelligen Bereich das FLAME-Modell die tatsächliche Varianz stark unterschätzt.

Zur Bewertung der verschiedenen Experimente werden in erster Linie Volumenund Temperaturtransporte herangezogen, die weniger sensitiv von der speziellen Auflösung des FLAME-Modells abhängen als kurzskalige Details des Geschwindigkeitsfeldes. Der hydrographische Schnitt wird dazu in fünf Regionen unterteilt, wie in Abb. 5.2 gezeigt. Die Aufteilung orientiert sich am DYNAMO Projekt (Barnard *et al.*, 1997; Willebrand *et al.*, 2000), wo unter anderem ein transatlantischer Schnitt entlang 25°N untersucht wird. Die einzelnen Regionen sind nach dem jeweils für sie charakteristischen Regime benannt: die Floridastraße (I), der Antillenstrom (II), das Rezirkulationsregime östlich von 73°W oberhalb von 1000 m (III), der tiefe westliche Randstrom unterhalb von 1000 m (IV) und die relativ ruhige Tiefsee unterhalb von 1000 m und östlich von 73°W (V). Die mittleren Volumen und Temperaturtransporte (Jahresmittel über das elfte FLAME-Jahr) sind in Tab. 5.2 auf Seite 81 aufgelistet.



Abb. 5.1: Fourier Leistungsspektrum der Oberflächenauslenkung ζ und der vertikal integrierten Volumen- (ϕ_V) und Temperaturtransporte (ϕ_θ) des FLAME-Modells; zeitliche Mittelwerte entlang 24°N im elften Modelljahr.

5.3 Modellkonfiguration

In Kapitel 2 wurden bereits die Gewichte der einzelnen Terme der Kostenfunktion in allgemeiner Form beschrieben. Jetzt werden Einzelheiten der Wahl der Gewichte und weiterer Parameter angegeben, die für die Untersuchung dieses Kapitels spezifisch sind. Ferner werden acht Experimente vorgestellt und erläutert, auf deren Resultate im nächsten Abschnitt näher eingegangen werden wird.

5.3.1 Wahl der Parameter und Gewichte

Antrieb und Topographie

Bei allen Experimenten mit dem aus FLAME entnommenen Datensatz sind die Oberflächenrandbedingungen der Vertikalgeschwindigkeit des inversen Modells aus einem langjährigen klimatologischen Mittel der Windschubspannung τ ermittelt (Trenberth *et al.*, 1990). Als *a priori* Fehler der Randbedingung wird die Standardabweichung



Abb. 5.2: Vertikalschnitt bei 24°N. Dargestellt ist die Aufteilung in verschiedende Regimeregionen. I: Floridastraße, II: Antillenstrom, III: Rezirkulation oberhalb 1000 m und östlich von 73°W, IV: tiefer westlicher Randstrom, V: Tiefsee unterhalb 1000 m und östlich von 73°W.

von τ angesetzt. Diese hat die gleiche Größenordnung wie die Windschubspannung selbst. Um einen mittleren Einfluss der Ekmantransporte abschätzen zu können, wird zur Berechnung der Ekmangeschwindigkeit ebenfalls das klimatologische Mittel der Windschubspannung verwendet. Das FLAME-Modell wird dagegen durch Monatsmittel angetrieben.

Die Bodenneigung ∇H für die Bodenrandbedingung wird aus der FLAME-Modelltopographie durch finite Differenzen berechnet. Durch die grobe Auflösung der Modelltopographie nimmt die Neigung kleinere Werte an, als man aus einer wirklichkeitsnäheren Topographie (z.B. ETOPO5, NOAA, 1988) erhalten würde.

Referenzgeschwindigkeit

Der jeweils tiefste Geschwindigkeitspunkt zwischen zwei Stationen, liefert die Schätzung der Referenzgeschwindigkeit \mathbf{u}_{ref} . Die zeitliche Dispersion des Betrages dieser Geschwindigkeit $\int_{t_0}^{t_1} |\mathbf{u}_{ref}|^2 dt/(t_1 - t_0)$ der einjährigen Zeitserie dient als *a priori* Schätzung der Fehlervarianz der Referenzgeschwindigkeit. Der *a priori* Fehler nimmt damit Werte von 1–2 cm/s in den Tiefseebecken und 10–25 cm/s im Bereich der westlichen Randströme an. Die Referenzgeschwindigkeit der ersten Schätzung, die auch gleichzeitig als Hintergrund für die Referenzgeschwindigkeit dient, wird dem Datensatz zu demselben Zeitpunkt entnommen wie die Daten für Temperatur und Salzgehalt. Diese Information über die absolute Geschwindigkeit steht bei einem echten hydrographischen Schnitt nicht zur Verfügung und muss durch eine Schätzung ersetzt werden.



Abb. 5.3: Schwarz: Horizontal gemittelte Amplituden der zeitlich gemittelten Salzgehalt- und Temperaturgradienten normal zum hydrographischen Schnitt entlang 24°N. **Grau:** Horizontale Varianz der zeitlichen Mittelwerte der Normalgradienten von Salzgehalt und Temperatur.

Strömungsmessungen

Der Floridastrom gehört zu denjenigen Strömungen im Ozean, für die umfangreiche und lange Zeitreihen von Strömungsdaten vorliegen. Aus ihnen können statistisch zuverlässige Mittelwerte berechnet werden. Um diese Situation im Zwillingsexperiment zu simulieren, werden in der Floridastraße jeweils drei Jahresmittelwerte der Geschwindigkeit in den Tiefen 37 m, 146 m und 748 m (4., 11. und 23. Schicht des FLAME-Modells) als Verankerungsmessungen mit einem kleinen Fehler von 1 cm/s verwendet. Diese "Messungen" ermöglichen dem inversen Modell, hier ein der FLAME-Modellrealität entsprechendes Strömungsfeld zu erzeugen.

Hydrographie

Als hydrographische Daten stehen im FLAME-Datensatz nur Salzgehalt und Temperatur zur Verfügung. Ihre Normalgradienten entstehen durch einfache finite Differenzen zwischen den beiden dem Schnitt nördlich und südlich gelegenen Reihen des FLAME-Gitters. "Klimatologische" Normalgradienten werden aus dem zeitlichen Mittel der Zeitserie gebildet. Auch diese Information ist wie die Referenzgeschwindigkeiten in der Realität in dieser Form im Allgemeinen nicht verfügbar. Stattdessen muss man sie sich aus klimatologischen Atlanten beschaffen, die aus Interpolation von verhältnismäßig wenigen Daten über große Gebiete und Zeiträume entstanden sind. Die *a priori* Fehler der Normalgradienten werden für jede Schicht aus ihrer horizontalen Varianz geschätzt. Dieser Schätzung nach sind sie etwa um den Faktor eins bis zwei größer als ein Mittelwert der Beträge der Gradienten selbst (Abb. 5.3). Zusätzlich erhält die Abweichung der Modellschätzung vom "klimatologischen" Normalgradienten ein kleines Gewicht, das proportional zum lokalen Gitterzellenvolumen ($\Delta x \Delta y \Delta z$) ist. Eine Abweichung vom "klimatologischen" Zustand wird dann nur sehr schwach bestraft, wobei die kleinsten Gewichte in den hochaufgelösten westlichen Randströmen auftreten, in denen die höchste Variabilität zu erwarten ist. Dadurch soll dem Wunsch Rechnung getragen werden, diese mittelbaren Daten der "Klimatologie" nur als Hintergrundfeld zu verwenden.

"Messdaten" für Temperatur und Salzgehalt werden der ersten zur Verfügung stehenden Momentaufnahme des FLAME-Modells ("03. Januar") entnommen. Die Wahl des Zeitpunktes ist zunächst willkürlich. Die Möglichkeit, dass die Ergebnisse dieser Untersuchung von der Wahl des Zeitpunktes abhängen, wird hier nicht untersucht. Man muss aber feststellen, dass sich die Volumen- und Temperaturtransporte zu dem Zeitpunkt der "Messung" unterhalb von 1000 m sehr von ihren Mittelwerten unterscheiden (siehe Tab. 5.2).

Eine wirklich synoptische Messung des Dichtefeldes kann man bei hydrographischen Messkampagnen mit einem Schiff nicht erhalten, da sowohl Schiff als auch Messprozess zu langsam sind. Allerdings sind auch die Bewegungen des Ozeans verhältnismäßig langsam, so dass man zu einem Schnitt gehörende hydrographische Daten im Allgemeinen doch als quasi-synoptisch betrachtet. Ganachaud (2000) schätzt den Fehler, der durch diese Annahme gemacht wird, in mittleren Breiten als vernachlässigbar ein.

Die zulässigen Abweichungen des zu schätzenden Zustands von der "Messung" wird aus den Kovarianzen von Temperatur und Salzgehalt geschätzt (siehe Abschnitt 2.5.3).

Glattheit der Modelllösung

Das Verhältnis der charakteristischen Skalen der Bewegung in vertikaler und horizontaler Richtung, auch Aspektverhältnis genannt, ist für ein langsames und großskaliges Regime sehr viel kleiner als eins (Pedlosky, 1987). Das Rechengitter des Modells ist so proportioniert, dass sich das Aspektverhältnis im Verhältnis der vertikalen und horizontalen Gitterlänge widerspiegelt. Da die vertikale Schichtung natürlicherweise größer ist als die horizontale, würden die zweiten Ableitungen in vertikaler Richtung in der Kostenfunktion zu stark bestraft werden. Um Rauheit in beiden Richtungen gleichstark zu bestrafen, werden die zweiten Ableitungen des Glattheitsoperators \hat{S}_C (siehe Seite 20) mit den Quadraten der lokalen Gitterlängen Δx und Δz gewichtet:

$$\hat{S}_C = \frac{\partial}{\partial x} \Delta x^2 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \Delta z^2 \frac{\partial}{\partial z}.$$
(5.1)

In der Floridastraße und am Kontinentalabhang vor den Bahamas befinden sich starke horizontale Salzgehalts- und Temperaturgradienten entlang des Schnittes. Sie sind der hydrographische "Fingerabdruck" der geostrophischen Komponente der westlichen Randstromsysteme: des nach Norden gerichteten Floridastroms und des tiefen westlichen Randstroms, der nach Süden fließt. Durch eine starke räumliche Glättung der hydrographischen Felder mit dem Glattheitsoperator \hat{S}_C würden diese Gradienten verloren gehen und mit ihnen die geostrophische Komponente der Randströme. Um dies zu vermeiden, wird für das Gewicht der Glattheit von Temperatur und Salzgehalt $W_{\hat{S}C}$ der Faktor 10^{-3} zur Reduktion festgelegt.

Die horizontale Geschwindigkeit u und die Quellen q_n der Erhaltungsgleichungen (2.28) werden als repräsentativ für die jeweilige Gitterzelle betrachtet, in deren Zentrum sie definiert sind. Deshalb wird die Rauheit dieser Größen proportional zum lokalen Gitterzellenvolumen ($\Delta x \Delta y \Delta z$) gewichtet. Das Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Rauheit wird wie bei Temperatur und Salzgehalt durch die lokalen Gitterzellenlängen angepasst.

Transporte

Da das FLAME-Modell keinen Einstrom aus dem Arktischen Ozean erhält, muss der mittlere Volumentransport durch einen zonalen Transatlantikschnitt klein sein. Die Differenz zwischen Verdunstung und Niederschlag in den Gebieten nördlich 24°N kann nicht zu Meeresspiegeländerungen führen, durch die ein großer meridionaler Nettotransport notwendig würde. Für das inverse Modell wird deshalb *a priori* ein integrierter Volumentransport durch den hydrographischen Schnitt von $\phi_V^* = 0 \pm 1$ Sv angesetzt. Über den integrierten Temperaturtransport ϕ_{θ}^* oder den Transport durch Teile des Schnittes, zum Beispiel die Floridastraße, werden keine zusätzlichen expliziten Annahmen gemacht.

Oberflächenauslenkung und Geoidfehler

Die Zeitserie der FLAME-Oberflächentopographie wird über das elfte Modelljahr gemittelt. Dieser Mittelwert soll als Schätzung eines stationären Zustands dienen, ohne dass der Anspruch erhoben wird, auf diese Weise den tatsächlichen stationären Zustand des FLAME-Modells erhalten zu haben. Dazu wäre vermutlich ein längerer Mittelungszeitraum notwendig. Aus dem Jahresmittel werden gemäß Abschnitt 3.3 "Daten" $\hat{Q}_{\zeta}|\zeta^*\rangle$ entlang 24°N und ihre Gewichtsmatrix W_{ζ} gebildet. Als *a priori* Fehlerschätzung für die Meereshöhe *h* dienen die Fehler, die Hernandez und Schaeffer (2000) für die mittlere Meereshöhe SHOMCLSv.98.2 angeben. Sie werden bilinear auf das FLAME-Gitter interpoliert. Diese Fehler sind unkorreliert und steigen zu den Küsten hin sehr stark an. Hernandez und Schaeffer haben die Schätzung der Meereshöhe über die Küsten hinaus extrapoliert. Der Anstieg der Fehler in der Nähe der Küsten ist zum Teil durch dieses Verfahren zu erklären. Er wird hier auf 4 cm beschränkt, um den Randeffekt zu reduzieren. Gleichzeitig könnten dadurch aber auch die möglichen Abweichungen vom Mittelwert unterschätzt werden, die die Variabilität des küstennahen Floridastroms verursacht. In den übrigen Bereichen beträgt der Fehler etwa 2 cm. Als *a priori* Schätzung des Geoidfehlers steht die Fehlerkovarianzmatrix des Geoids EGM96 bis Grad und Ordnung der Kugelflächenfunktionsentwicklung L = 70 (Lemoine *et al.*, 1997) zur Verfügung. Das Geoidmodell liegt bis Grad und Ordnung L = 360 vor, aber da für diese hohen Grade die Fehler nicht aus den Normalgleichungen berechnet wurden, soll das EGM96 hier nur bis zum Grad 70 als vollständig betrachtet werden. Die Fehler des EGM96 betragen auf Wellenlängen \geq 570 km etwa 8 cm über dem offenen Ozean und bis zu 20 cm in der Floridastraße.

Neben dem gegenwärtigen Geoidmodell EGM96 stehen homogene, isotrope Fehlerschätzungen derjenigen Geoidmodelle zur Verfügung, die aus gravimetrischen Messungen der zukünftigen Satellitenmissionen GRACE (Tapley, 1997) und GOCE (Battrick, 1999) abgeleitet werden sollen. Die Fehlerabschätzungen entstehen aus Simulationen der Messungen bei bekannten Messgeräteeigenschaften (Balmino et al., 1998). Die kumulativen Fehler dieser Schätzungen wurden bereits in Abb. 3.3(b) gezeigt. Für das GRACE Geoid wird die Fehlerschätzung bei L = 70 abgebrochen, da oberhalb dieses Grades die Fehler stark ansteigen. Für GOCE wird L = 200 als maximaler Grad gewählt. Dies entspricht der Auflösung $\lambda/2 \approx 100$ km, die als grundsätzliche Anforderung an die Mission gilt. Die Fehlerschätzungen belaufen sich dann auf den entsprechenden Wellenlängen auf 0.6 mm für GRACE und 6 mm für GOCE, sind also in beiden Fällen gegenüber dem Fehler der Meereshöhe h der Ordnung O(2 cm) vernachlässigbar. Ein unterschiedlicher Einfluss dieser beiden hypothetischen Geoidmodelle wäre daher hauptsächlich auf die bessere Auflösung des GOCE Geoidmodells zurückzuführen. Durch dieses Geoidmodell wird man auch den spektralen Bereich zwischen 200 km und 500 km auflösen können (siehe Abb. 5.1 auf Seite 72).

Die *a priori* Fehlerkovarianzen C_M , aus denen nach Abschnitt 3.3 die Gewichtsmatrizen W_M gewonnen werden, sind in Abb. 5.4 zu sehen. Die Unterschiede in Genauigkeit und Auflösung der zugrunde liegenden Geoidmodelle werden hier deutlich sichtbar. Für das EGM96 ist die Diagonale der Kovarianzmatrix um über eine Größenordnung größer als für die beiden anderen Geoidmodelle. Da für GRACE und GOCE der Geoidfehler vernachlässigbar klein ist, bestehen die Kovarianzmatrizen hier praktisch nur aus den ursprünglich unkorrelierten Fehlern der Meereshöhe h. Durch die Glättung dieser Fehler werden hier aber die unterschiedlichen Korrelationslängen der Geoidmodelle GRACE und GOCE aufgeprägt, anhand derer die bessere Auflösung der GOCE Geoids deutlich wird.



Abb. 5.4: A priori Fehlerkovarianzmatrizen C_M (Gleichung (3.20)) der Oberflächenauslenkung für die Experimente EGM96A, EGM96B (a), GRACEA, GRACEB (b), GOCEA, GO-CEB (c). Man beachte, dass die EGM96 Fehlervarianzen über eine Größenordnung größer sind als diejenigen der beiden anderen Geoidmodelle. Die beiden unterschiedlichen Auflösungen sind deutlich daran zu erkennen, dass die "Pseudoperiode" der Kovarianz, also die Breite der Hauptdiagonalen, für EGM96 und GRACE etwa gleich ist, während sie für GOCE sehr viel kürzer ausfällt.

5.3.2 Experimente

Insgesamt werden in diesem Kapitel acht Experimente behandelt, die in zwei Gruppen von jeweils vier Experimenten aufgeteilt sind.

Die Gruppe A setzt sich aus den Experimenten NOSSHA, EGM96A, GRACEA und GOCEA zusammen. Bei NOSSHA werden nur Hydrographie- und Geschwindigkeitsdaten wie beschrieben zur Schätzung der Transporte verwendet, während bei den übrigen drei Experimenten zusätzlich das Jahresmittel der Oberflächenauslenkung als Daten zum Einsatz kommen. Diese drei Experimente unterscheiden sich durch die Wahl der Gewichte W_{ζ} , d.h. der Auflösung und Genauigkeit gemäß der Geoidmodelle EGM96, GRACE und GOCE. Die Experimente der Gruppe B sind eine Wiederholung

Gruppe A					
NOSSHA	Hydrographie und Geschwindigkeitsmessung ohne Ober-				
	flächenauslenkungsdaten				
EGM96A	Hydrographie und Geschwindigkeitsmessung mit Ober-				
	flächenauslenkungsdaten, nur langwellige Komponenten mit				
	großen Fehlern des EGM96 Geoidmodells				
GRACEA	Hydrographie und Geschwindigkeitsmessung mit Ober-				
	flächenauslenkungsdaten, nur langwellige Komponenten mit				
	kleinen Fehlern des GRACE Geoidmodells				
GOCEA	Hydrographie und Geschwindigkeitsmessung mit Ober-				
	flächenauslenkungsdaten, langwellige und kurzwellige Kom-				
	ponenten mit kleinen Fehlern des GOCE Geoidmodells				
Gruppe B					
NOSSHB	wie NOSSHA,) indach mit 1000 mal größerem Cowicht				
EGM96B	wie EGM96A, Jedoch mit 1000 mai groberem Gewicht				
GRACEB	wie GRACEA, tale Gasebwindigkeit				
GOCEB	wie GOCEA, J tale Geschwindigkeit				

Tab. 5.1: Übersicht über alle Experimente dieses Kapitels.

der Experimente der Gruppe A mit um den Faktor 10³ erhöhtem Gewicht der Glattheitsforderung für die horizontale Geschwindigkeit. Hier soll untersucht werden, ob man durch ein glatteres Geschwindigkeitsfeld das Jahresmittel besser schätzen kann. Die Experimente sind in Tab. 5.1 zusammengefasst.

Durch die Wahl der "Stationen" und Tiefenschichten beträgt die Zahl der unabhängigen Variablen 12323. Deshalb kann die Hessematrix nicht wie in Kapitel 4 für die Fehlerrechnung direkt invertiert werden, sondern man muss das iterative Verfahren von Yaremchuk und Schröter (1998) verwenden.

In allen Experimenten wurde eine Reduktion der Norm des Gradienten der Kostenfunktion um 10^{-3} nach weniger als 1000 Iterationsschritten erreicht. Die Kosten reduzierten sich dabei um durchschnittlich 96 % des Anfangswertes. Da die Konditionszahl *C* der Hessematrix in allen Experimenten etwa 10^7 beträgt, sind zur Berechnung eines jeden Fehlerwertes etwa 4000 Aufrufe des linearisierten Modells zur Multiplikation des Hessematrix mit einem Vektor notwendig (siehe Abschnitt 2.5.6). Abb. 5.5 zeigt beispielhaft die Källén-Lehmann Spektralfunktionen der Hessematrix und der Volumen- und Temperaturtransporte durch die Regionen I bis V für das Experiment NOSSHA. Für einige Transporte ϕ_V und ϕ_{θ} tragen die kleinsten Eigenwerte kaum zu den Fehlern bei, denn die dazugehörigen Spektralfunktionen gehen für kleine Eigenwerte schneller gegen null als die Spektralfunktion der Hessematrix.

Die schlechte Kondition der Hessematrix verhindert, dass Terme mit Hintergrund-



Abb. 5.5: Källén-Lehmann Spektralfunktionen der Hessematrix und der Volumen- und Temperaturtransporte durch die Regionen I-V aus Experiment NOSSHA. Die Konditionszahl der Hessematrix ist von der Größenordnung O(10⁷). Der Beitrag zur Varianz der Tranporte geht aber schon vor diesem Wert gegen null, so dass 4000 Iterationen zur Berechnung der Fehler ausreichen.

feldern wie den Normalgradienten von Temperatur und Salzgehalt aus der Kostenfunktion weggelassen werden können. Auf der einen Seite könnte man dadurch eine größere Unabhängigkeit der Schätzung erreichen, andererseits würde die Fehlerrechnung ein sinnvolles Maß an Aufwand (Rechenzeit) übersteigen (siehe Kapitel 4).

Die nun folgende Diskussion der Ergebnisse orientiert sich an den geschätzten Transporten und ihren Fehlern, die in Tab. 5.2 bzw. in Abb. 5.6 im Vergleich mit den Referenzwerten dargestellt sind. Die Referenzwerte wurden aus dem FLAME-Modell ermittelt.

	Floridastraße	Antillenstrom	Rezirkulation	tiefer westlicher	Tiefsee	Gesamt
			oberhalb 1000 m	Randstrom	unterhalb 1000 m	
Volumentransport ϕ_V [Sv]	(l)	(11)	(III)	(IV)	(V)	
FLAME Mittelwerte	25.1 ± 2.9	9.3 ± 4.5	-23.3 ± 3.2	-15 ± 8	3 ± 7	-0.2 ± 0.3
FLAME (,,03. Januar")	27.4	7.1	-23.4	- 1.7	-9.7	-0.4
NOSSHA	24.3 ± 1.5	3.5 ± 8.7	-17.0 ± 8.0	-11 ± 13	0 ± 15	0.0 ± 1.0
EGM96A	24.4 ± 1.5	4.2 ± 7.8	-17.1 ± 7.0	-10 ± 13	-1 ± 15	0.0 ± 1.0
GRACEA	24.3 ± 1.4	5.2 ± 6.9	-17.8 ± 6.1	-10 ± 13	-1 ± 14	0.0 ± 1.0
GOCEA	23.0 ± 1.0	3.6 ± 5.4	-16.2 ± 4.0	-9 ± 12	-1 ± 13	0.0 ± 1.0
NOSSHB	25.3 ± 1.1	1.3 ± 6.5	-16.1 ± 6.4	-12.5 ± 9.5	2 ± 12	0.0 ± 1.0
EGM96B	25.3 ± 1.1	2.5 ± 5.9	-16.8 ± 5.9	-12.6 ± 9.3	1 ± 11	0.0 ± 1.0
GRACEB	25.3 ± 1.1	4.1 ± 5.0	-17.8 ± 4.2	-12.9 ± 9.0	1 ± 10	0.0 ± 1.0
GOCEB	23.8 ± 0.9	3.6 ± 4.0	-17.1 ± 2.6	-12.3 ± 8.9	2 ± 10	0.0 ± 1.0
Temperaturtransport ϕ_{θ} [PW]						
FLAME Mittelwerte	1.91 ± 0.23	0.80 ± 0.33	-1.79 ± 0.22	-0.26 ± 0.10	0.08 ± 0.09	0.74 ± 0.13
FLAME (,,03. Januar")	2.07	0.66	-1.81	-0.15	0.04	0.73
NOSSHA	1.91 ± 0.14	0.41 ± 0.72	-1.37 ± 0.67	-0.27 ± 0.21	0.08 ± 0.22	0.76 ± 0.44
EGM96A	1.91 ± 0.14	0.47 ± 0.64	-1.37 ± 0.59	-0.26 ± 0.20	0.06 ± 0.21	0.81 ± 0.36
GRACEA	1.91 ± 0.13	0.56 ± 0.56	-1.42 ± 0.53	-0.26 ± 0.20	0.06 ± 0.20	0.83 ± 0.25
GOCEA	1.78 ± 0.09	0.42 ± 0.40	-1.28 ± 0.30	-0.24 ± 0.19	0.05 ± 0.19	0.73 ± 0.21
NOSSHB	1.99 ± 0.11	0.21 ± 0.52	-1.27 ± 0.52	-0.27 ± 0.15	0.09 ± 0.17	0.76 ± 0.38
EGM96B	2.00 ± 0.11	0.32 ± 0.47	-1.32 ± 0.43	-0.27 ± 0.15	0.08 ± 0.16	0.80 ± 0.32
GRACEB	2.00 ± 0.10	0.46 ± 0.38	-1.41 ± 0.34	-0.27 ± 0.14	0.09 ± 0.15	0.84 ± 0.21
GOCEB	1.84 ± 0.08	0.41 ± 0.27	-1.36 ± 0.17	-0.26 ± 0.14	0.09 ± 0.14	0.73 ± 0.18

Tab. 5.2: Vergleich der Volumentransporte ϕ_V (in Sv, obere Tabelle) und der Temperaturtransporte ϕ_{θ} (relativ zu 0 °C in PW, untere Tabelle) mit den FLAME-Vergleichswerten: Schätzungen des inversen Modell mit geringer Glattheitsforderung (Gruppe A, Mitte) und großer Glattheitsforderung für die horizontale Geschwindigkeit (Gruppe B, unten). Die Werte sind in Abb. 5.6 graphisch dargestellt.



Abb. 5.6: FLAME-Jahresmittel mit Standardabweichung und momentane Werte vom "03. Januar" der Volumen- (oben) und Temperaturtransporte (unten) durch die Regionen I bis V, sowie Schätzungen durch das inverse Modell mit Fehlerangaben.

5.4 Ergebnisse

5.4.1 Experimente mit wenig Glattheit (Gruppe A)

Die Schätzungen der Volumen- und Temperaturtransporte der vier Experimente NOSSHA, EGM96A, GRACEA und GOCEA mit kleiner Glattheitsforderung für die horizontale Geschwindigkeit sind innerhalb ihrer formalen Fehler nicht unterscheidbar. In der Floridastraße sind die *a posteriori* geschätzten Fehler des Volumentransports sehr klein, da hier das Strömungsfeld durch sehr genaue Messungen der Geschwindigkeit (*a priori* Fehler = 1 cm/s) gut bekannt ist. Die Fehler entsprechen der Schätzung der klimatologischen Varibilität des echten Floridastroms von 1 Sv durch Schott *et al.* (1988). Der Fehler des Gesamtvolumentransports beträgt nur 1 Sv, da auch dieser *a priori* als bekannt vorrausgesetzt worden ist. In den tiefen Regionen IV und V weisen die Volumentransporte Fehler von bis zu 15 Sv auf, weil hier Transporte wie Fehler mit großen Flächen gewichtet werden. Auch der Antillenstrom (Region II) sowie das Rezirkulationsregime östlich von 73°W und oberhalb 1000 m (Region III) sind mit großen Ungenauigkeiten behaftet.

Die Fehler der Temperaturtransporte sind ähnlich verteilt, jedoch sind die Fehlerschätzungen für die tiefen Regionen IV und V im Vergleich zu den Volumentransporten relativ klein. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Temperatur, mit der der Volumentransport gewichtet wird, in der Tiefsee gering ist. Die Temperaturtransporte selbst sind in der Tiefe aus dem gleichen Grund klein.

Reduktion der Fehler durch Daten der Oberflächenauslenkung

Abb. 5.7 zeigt die relative Reduktion der Transportfehler bei Verwendung von Oberflächenauslenkungsdaten in den Experimenten EGM96A, GRACEA und GOCEA. Mit zunehmender Genauigkeit und Auflösung der Daten der Oberflächenauslenkung ζ^* bekommen die Schätzungen der Transporte kleinere *a posteriori* Fehler. Die Reduktion der Fehler ist am größten für die oberflächennahen Schichten (Regionen I bis III), denn die absolute Geschwindigkeit an der Oberfläche kann mit den zusätzlichen Daten besser bestimmt werden. Die Fehler des Dichtefeldes durch Abweichungen von Temperatur und Salzgehalt von den Messungen summieren sich mit zunehmender Tiefe im thermischen Wind immer weiter auf, so dass die Geschwindigkeit in der Tiefe nicht mehr so gut zu bestimmen ist wie diejenige nahe der Oberfläche. Deshalb ist die Reduktion der Fehler durch Oberflächenauslenkungsdaten in der Tiefe geringer als an der Oberfläche (LeGrand, 2000).

Die Reduktion der Transportfehler gegenüber Experiment NOSSHA ist gering für den Fall, in dem zur *a priori* Fehlerschätzung der Oberflächenauslenkung die EGM96 Geoidfehler verwendet wurden. Mit genauerer Kenntnis des Geoids, hier repräsentiert durch die kleineren Fehler des potentiellen GRACE Geoidmodells, können Transporte nahe der Oberfläche um bis zu 23% genauer geschätzt werden. Der totale Temperaturtransportfehler als großskaliges Phänomen erfährt sogar eine Verbesserung von 44%.



Abb. 5.7: Reduktion (in %) der geschätzten Transportfehler gegenüber NOSSHA durch den Einsatz von Oberflächenauslenkungsdaten in den Experimenten der Gruppe A.

Mit dem auf langen Skalen sehr genauen GRACE Geoidmodell können also langwellige Größen viel besser geschätzt werden als kleinskalige. Die Schätzung bereits gut bekannter Transporte von Strömungen mit kleiner horizontaler Ausdehnung, wie der des Floridastroms, lässt sich nur durch Oberflächenauslenkungsdaten mit einer gegenüber dem EGM96 erhöhten Auflösung bei gleichzeitig vergrößerter Genauigkeit verbessern. Mit den GOCE Geoidfehlern kann der Fehler der Transporte in der Floridastraße um 30 – 34% reduziert werden. Die verbesserte Auflösung in diesem Experiment führt ebensfalls zu deutlich kleineren Fehlern der übrigen oberflächennahen Transporte. Sie sind gegenüber NOSSHA um bis zu 55% reduziert. Der Effekt der Oberflächenauslenkungsdaten auf die großen Volumen- sowie kleinen Temperaturtransportfehler in den tiefen Regionen IV und V ist kleiner als 15%.

Der *a priori* Fehler des Volumentransports durch dem gesamten Schnitt von 1 Sv kann auch mit den genauesten Daten in GOCEA nicht reduziert werden. Der entsprechende Temperaturtransport jedoch, über den *a priori* nichts bekannt war, kann mit den Oberflächenauslenkungsdaten um bis zu 51% genauer geschätzt werden als ohne. Mit dem ungenaueren EGM96 ist immerhin noch eine Verbesserung von 18% möglich.

Vergleich der Transporte mit der FLAME-,,Realität"

Die Transporte von Temperatur und Volumen der Experimente NOSSHA, EGM96A und GRACEA weichen um weniger als ihre geschätzten Fehler von den mittleren Transporten des FLAME-Modells ab (Abb. 5.6). Insgesamt unterschätzt das inverse Modell die Beträge der Mittelwerte. Diese systematische Abweichung der Transporte von den Vergleichswerten hat unterschiedliche Gründe. Als wichtigste Ursache erscheint die Tatsache, dass kleine Gradienten im gemessenen Dichtefeld, die a priori zu schwacher geostrophischer Scherung und damit zu schwachen Volumentransporten führen, durch die Inversion mit den Straftermen für Rauigkeit nicht verstärkt werden können. Im Gegenteil: Die Methode der kleinsten Quadrate führt implizit zu glatteren Lösungen (Thacker, 1988a; Bennett, 1992, Seite 301). Insbesondere die Unterschätzung des mittleren Volumentransports des tiefen westlichen Randstroms und des Antillenstroms ist darauf zurückzuführen. Diese beiden Strömungen unterliegen im FLAME-Modell einer großen zeitlichen Variabilität und haben zum Zeitpunkt der "Dichtemessung" sehr viel kleinere Werte als ihr Mittel. Aus diesem Blickwinkel entpuppt die Wahl des "03. Januars" als Messzeitpunkt als eine Erschwernis für das inverse Modell. Die schwachen Dichtegradienten der Messung kann das inverse Modell nicht korrigieren, so dass auch die geschätzten Transporte kleiner sind als die Referenzwerte. In diesem Fall sind zusätzliche Informationen über die mittlere vertikale Schichtung des Systems notwendig, zum Beispiel aus einem klimatologischen Atlas, um einen mittleren Zustand besser schätzen zu können. Die barotrope Information der Oberflächenauslenkung allein genügt nicht.

Eine weitere Ursache liegt in den unterschiedlichen Windfeldern, die zu unterschiedlichen Ekmantransporten führen können. So beträgt der Ekmantransport aus dem klimatologischen Windfeld von Trenberth *et al.* (1990) durch Region III 6.3 Sv nach Norden, während die gleiche Rechnung mit dem Mittelwert der Monatsmittel, die das FLAME-Modell antreiben, 3.9 Sv ergibt. Dieser Unterschied ist nur für die oberflächennahen Transporte von Bedeutung. Versuche mit verringertem Ekmantransport haben aber zu keiner bedeutenden Verbesserung der Transportschätzungen geführt (hier nicht gezeigt), so dass der Effekt des unterschiedlichen Windantriebs als gering eingeschätzt wird.

Wenn die Oberflächenauslenkung mit sehr hoher Genauigkeit und Auflösung zur Verfügung steht wie im Experiment GOCEA, dann reduzieren sich zwar wie gesehen die formalen Transportfehler des inversen Modells um bis zu 55%. Gleichzeitig "verschätzt" sich das Modell aber in den Regionen oberhalb von 1000 m (Floridastraße, Antillenstrom und Rezirkulationsregime östlich von 73°W), so dass hier innerhalb der kleinen *a posteriori* Fehler Modell- und Referenzwerte nicht übereinstimmen.

Zwei *a priori* Annahmen können für diese Abweichung verantwortlich gemacht werden. Zum einen wurde der *a priori* Fehler der Meereshöhe h an den Rändern des Modellgebietes auf 4 cm reduziert. Eine Vergrößerung in diesem Bereich könnte zu

größeren *a posteriori* Fehlern der Transporte vor allem in der Floridastraße führen, so dass hier sich zwar die Schätzung selbst nicht ändert, aber aufgrund ihrer größeren Fehler mit den Vergleichswerten verträglich ist. Zum anderen musste die Oberflächentopographie senkrecht zum Schnitt als homogen angenommen werden (Kapitel 3). Diese Annahme stellt besonders auf den kurzen Skalen des GOCE Geoidmodells eine grobe Näherung dar.

Die Abweichung der Transportschätzungen durch das inverse Modell von den FLAME-Referenzwerten zeigt, dass in der Nähe der Oberfläche einige Modellannahmen mit den sehr genauen Daten nicht konsistent sind. Hier ist die Annahme der Stationarität und das Fehlen einer vermischten Deckschicht in der Dynamik des inversen Modells als mögliche Ursache zu nennen. Die Annahme, dass thermischer Wind der einzige dynamisch relevante Prozess oberhalb von 1000 m ist, erscheint im Zusammenhang mit den genauen Daten des GOCE Experiments ebenfalls als eine zu starke Einschränkung. Schließlich kann das inverse Modell in den Erhaltungsgleichungen für potentielle Temperatur und Salzgehalt die turbulente Diffusion nicht berücksichtigen (siehe Abschnitt 2.5.1).

5.4.2 Experimente mit großer Glattheit der Geschwindigkeit (Gruppe B)

Ein direkter Vergleich der Geschwindigkeit der Experimente NOSSHB, EGM96B, GRACEB und GOCEB mit ihren weniger glatten Entsprechungen zeigt den Einfluss, den der Term \mathcal{J}_{Su} in der Kostenfunktion hat. Als Beispiel vergleicht Abb. 5.8 die horizontale Geschwindigkeit tangential und senkrecht zum hydrographischen Schnitt für die Experimente ohne Oberflächenauslenkungsdaten. Besonders bei der tangentialen Geschwindigkeit u ist die Unterdrückung kurzer Skalen deutlich zu erkennen.

In den tiefen Regionen IV und V liegen die geschätzten Volumentransporte in allen vier Experimenten der Gruppe B näher an den FLAME-Mittelwerten als in den entsprechenden Experimenten der Gruppe A (Abb. 5.6). Gleichzeitig sind die *a posteriori* Fehler dieser Transporte um 20–30% durch die zusätzliche *a priori* Annahme großer Glattheit der Lösung reduziert. Aus diesen Gründen können diese Schätzungen als Verbesserung beurteilt werden.

In den übrigen Regionen I bis III unterscheiden sich die Transportschätzungen nicht wesentlich von ihren Entsprechungen der Gruppe A. Die *a posteriori* Fehler auch dieser Transporte sind wie in der Tiefe etwa 20–30% kleiner. Da aber das inverse Modell in diesen oberflächnahen Regionen stark vom FLAME-Mittelwert abweichende Transporte schätzt, kann hier innerhalb der kleinen Fehler keine Übereinstimmung mit dem mittleren FLAME-Zustand erzielt werden.

Das inverse Modell mit großer Glattheit kann Volumen- und Temperaturtransport durch den gesamten Schnitt richtig schätzen. Der *a priori* Fehler des Volumentransports von 1 Sv kann dabei aber nicht reduziert werden. Der Temperaturtransportfehler verkleinert sich jedoch um 11–16% gegenüber den Experimenten der Gruppe A.



5.4 Ergebnisse

Abb. 5.8: Horizontale Geschwindigkeiten im Vergleich. **Oben:** NOSSHA mit geringer Glattheit der Geschwindigkeit, **unten:** NOSSHB mit glattem Geschwindigkeitsfeld. Durchgezogene Konturlinien bezeichnen ost- bzw. nordwärtige, gestrichelte, grau unterlegte Konturen westbzw. südwärtige Geschwindigkeiten. Das Konturintervall ist 2 cm/s.



Abb. 5.9: Korrelationen der Transportfehler; die ersten fünf Spalten und Zeilen beschreiben die Korrelationen der fünf Volumentransporte ϕ_V durch die Regionen I bis V; die letzten fünf die der Temperaturtransporte ϕ_{θ} .

5.5 A posteriori Kovarianzen

Abb. 5.9 zeigt die mit den Varianzen normierten Kovarianzen zwischen den Fehlern der Volumen- und Temperaturtransporte. Diese Matrizen beschreiben die Korrelation $C_{mn}/\sqrt{C_{mm}C_{nn}}$ zwischen dem *m*-ten und dem *n*-ten Transportfehler. Zum Vergleich ist auch die Korrelation der Standardabweichungen des FLAME-Modells von seinem mittleren Zustand abgebildet, die aus dem Ensemblemittel über die einjährige Zeitserie berechnet wurde.

FLAME-Referenz

Durch die Angabe der Kovarianzen zwischen zwei Transporten wird deutlich, wie sie im statistischen Mittel in Abhängigkeit voneinander um ihre Mittelwerte schwanken. So sind alle Volumentransporte mit Transporten durch horizontal benachbarte Regionen antikorreliert, während die vertikalen Korrelationen zweier benachbarter Transporte immer positiv ist, wenn auch schwächer als 0.6. Diese vertikale Korrelation kann als Ausdruck der barotropen Komponente der Strömung interpretiert werden, die hier in der Gesamtfluktuation dominiert, während die Fluktuationen der Transporte in den drei Bereichen I–III jeweils für benachbarte Paare gegenphasig sind: Ein starker Floridastrom geht im Mittel mit einem schwachen Antillenstrom, wegen der positiven Korrelation mit Letzterem mit einem starken tiefen westlichen Randstrom und starker Rezirkulation im Osten einher. Die Korrelation des Floridastroms mit den tiefen Regionen IV und V ist eine Folge ihrer vertikalen Kopplung mit den dazugehörigen Regionen oberhalb von 1000 m.

Die Korrelationen der Temperaturtransporte sind nahezu identisch mit denjenigen der Volumentransporte. Die stärkere negative Verknüpfung zwischen Floridastrom und tiefem westlichen Randstrom ist als ein Hinweis auf die Rolle dieser Bereiche für Variabilität des Transports von Temperatur bzw. Wärme zu sehen.

Alle Temperaturtransporte sind mit den dazugehörigen Volumentransporten beinahe perfekt korreliert. Das bedeutet, dass die Schwankungen des Temperaturfeldes phasengleich mit den Schwankungen der Strömungsgeschwindigkeit sind und/oder dass sie vernachlässigbar klein sind. Ähnliches gilt für Volumen- und Temperaturtransporte unterschiedlicher Regionen. Auch hier sind die Korrelationen nahezu identisch mit den Korrelationen der entsprechenden Volumen- oder Temperaturtransporte untereinander.

Korrelationen der Lösungen des inversen Modells

Bisher sind in der Lösung des inversen Modells die Varianzen der Transporte als formale Fehler aufgefasst worden. Jetzt werden sie als geschätzte Varianz der Abweichungen vom Mittelwert interpretiert. Die Kovarianz zwischen zwei Transporten erhält dann die gleiche Bedeutung wie im Referenzfall des FLAME-Modells.

Die Experimente NOSSHA und NOSSHB können die Korrelationen zwischen den Transporten nicht immer vollständig reproduzieren. Die horizontale Antikorrelation zwischen den Regionen II und III bzw. IV und V ist auch im inversen Modell vorhanden. Dagegen besteht zwischen der Floridastraße und den übrigen Regionen des Schnittes im Gegensatz zur FLAME-Referenz fast kein statistischer Zusammenhang, da das inverse Modell Strömungsfeld und Transport des Floridastroms unabhängig vom übrigen Schnitt durch die Strömungsmessungen bestimmt. Die vertikale Korrelation des inversen Modells ist für II und IV noch schwächer als bei der FLAME-Referenz und für III und V sogar leicht negativ (von der Grauabstufung in Abb. 5.9 nicht aufgelöst). Negative vertikale Korrelationen sind Ausdruck von Fluktuationen der vertikalen Scherung der Geschwindigkeit, die durch entsprechend große *a priori* Fehler der hydrographischen Felder zugelassen werden können. Diese Fehler sind in diesem Fall aber klein, so dass der negative Beitrag zur vertikalen Korrelation ebenfalls klein ist.

Die größere Glattheit in Experiment NOSSHB verstärkt positive Korrelationen zwischen benachbarten Regionen und schwächt negative ab. Dies entspricht den Erwartungen, denn im Grenzfall unendlich glatter, also räumlich konstanter Geschwindigkeit könnten die Volumentransporte nur in Phase um ihren jeweiligen Mittelwert schwanken, und alle Korrelationen zwischen den Transporten wären exakt eins.

Durch den Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten in den übrigen Experimenten werden einige Korrelationen des FLAME-Modells durch das inverse Modell besser geschätzt. Dies gilt besonders für die positiven vertikalen Korrelationen in den Rezirkulationsbereichen III und V, weil mit den Auslenkungsdaten die barotrope Komponente besser bestimmbar ist. Mit Oberflächendaten der Auflösung und Genauigkeit, die einem GOCE Geoid entsprechen, ist die beste Übereinstimmung mit den FLAME-Referenzwerten erreichbar, wenn auch die vertikalen Korrelationen überschätzt werden. Hier zeigt sich, dass die Oberflächenauslenkung hauptsächlich barotrope Information liefert. Durch die genauen Daten der GOCE Experimente wird die barotrope Geschwindigkeit (zu) genau bestimmt, während der barokline Anteil, der zu einer Abschwächung der vertikalen Korrelation führen kann, unverändert bleibt. Für die Experimente mit glatterer Geschwindigkeit gilt wieder, dass die Korrelationen benachbarter Regionen gegenüber den Experimenten der Gruppe A verstärkt sind.

Auch mit dem Einsatz von Oberflächenauslenkungsdaten bleibt der Betrag der Korrelation des Transports durch die Floridastraße mit dem übrigen Schnitt sehr viel kleiner als bei der FLAME-Referenz. Diese statistische Unabhängigkeit des Floridastroms ist die Folge der sehr genauen Geschwindigkeitsmessungen in der Floridastraße.

Systematische Unterschätzung der Tranporte außerhalb der Floridastraße

In Abschnitt 5.4.1 wurde eine systematische Unterschätzung der Transporte außerhalb der Floridastraße beschrieben. Durch die Kovarianzanalyse erhält man nun Hinweise darauf, wie es zu dieser Unterschätzung kommt. Die horizontale Antikorrelation zwischen den benachbarten Regionen II und III bzw. IV und V deutet auf einen Mechanismus, durch den das inverse Modell die Zwangsbedingung von verschwindendem Gesamttransport erfüllt: Das inverse Modell schätzt die Absolutwerte der Transporte des Antillenstroms (II) und des tiefen westlichen Randstroms (IV) zu klein. Als möglicher Grund wurden in Abschnitt 5.4.1 die sehr kleinen horizontalen Gradienten des Dichtefeldes aus der Messung genannt, wodurch die vertikale Scherung der Geschwindigkeit in diesem Bereich unterschätzt wird. Diese zu schwachen Transporte werden durch ebenfalls zu kleine Transporte östlich von 73°W kompensiert, damit der Gesamttransport richtig geschätzt wird. Die horizontale Antikorrelation der geschätzten Fehler weist darauf hin, dass größerer nordwärtiger ("positiverer") Transport westlich von 73°W durch größeren südwärtigen ("negativeren") Transport östlich von 73°W ausgeglichen wird und umgekehrt. Folgerichtig stimmen die Schätzungen der horizontalen Summe der Transporte (Region II + III und IV + V) besser mit den FLAME-Werten überein als die der vertikalen Summe (Abb. 5.10). In den Experimenten mit glatten Geschwindigkeiten sind besonders die Temperaturtransporte der zusammengesetzten Regionen II+IV und III+V deutlich unterschätzt, während die Forderung nach erhöhter Glattheit der horizontalen Geschwindigkeit zu einer verbesserten Schätzung der horizontalen Summen führt. Durch die horizontale Antikorrelation wird auch der Gesamttransport richtig geschätzt, selbst wenn die Stärke des Subtropenwirbels unterschätzt ist.



Abb. 5.10: FLAME-Jahresmittel mit Standardabweichung und momentane Werte vom "03. Januar" der Volumen- (oben) und Temperaturtransporte (unten) oberhalb (II + III) und unterhalb von 1000 m (IV + V), sowie westlich (II + IV) und östlich von 73°W (III + V), im Vergleich mit Schätzungen durch das inverse Modell mit Fehlerangaben.

5.6 Diskussion

Das inverse Modell wurde auf einen synthetischen Datensatz, bestehend aus Temperatur-, Salzgehalts- und Geschwindigkeitsverteilung sowie Oberflächentopographie, angewendet. Dieser Datensatz wurde von einem Modell der allgemeinen Ozeanzirkulation erzeugt. Das inverse Modell schätzt den Zustand des Modellozeans entlang eines fiktiven transatlantischen hydrographischen Schnittes bei 24°N aus einer synoptischen "Messung" der Temperatur- und Salzgehaltsverteilung sowie einem Jahresmittel einiger Geschwindigkeitswerte in der Floridastraße. Zusätzlich werden Oberflächenauslenkungsdaten unterschiedlicher Qualiltät verwendet, deren Genauigkeit und Auflösung sich an derzeitigen und zukünftigen Geoidmodellen orientiert. Der Vergleich von zwei mal vier Schätzungen mit einem zeitlich gemittelten Zustand des Zirkulationsmodells fällt unterschiedlich aus.

Ohne die *a priori* Forderung nach starker Glattheit der horizontalen Geschwindigkeit sind die Schätzungen von Temperatur- und Volumentransport durch fünf verschiedene Regionen des hydrographischen Schnittes mit den übrigen Modellannahmen konsistent. Diese Übereinstimmung gilt aber nur innerhalb der großen geschätzten Fehler. Durch zusätzliche Verwendung von Oberflächenauslenkungsdaten reduzieren sich die *a posteriori* Fehler dieser Transporte. Allerdings werden sie im Fall der genauesten Daten, die dem hypothetischen, hochauflösenden GOCE-Geoidmodell entsprechen, kleiner als die Abweichungen der Transportschätzungen von der Referenz. In diesem Fall müssen die Annahmen des inversen Modells einer kritischen Betrachtung unterzogen werden. Stationarität und die geostrophische Approximation erscheinen in diesem Zusammenhang mit den sehr genauen und hochauflösenden Daten als zu grobe Näherungen. Ferner ist die Annahme räumlich konstanter Oberflächenauslenkung senkrecht zum Schnitt auf kurzen Skalen nicht haltbar.

Wenn man die Forderung nach einem glatten horizontalen Geschwindigkeitsfeld einführt, werden durch diese zusätzliche Annahme die formalen Fehler der Transportschätzungen so stark reduziert, dass in den Bereichen oberhalb von 1000 m Wassertiefe das Modell um mehr als seine geschätzten Fehler von der Referenz abweicht. Die horizontale Summe der Transporte wird jedoch auch oberhalb von 1000 m richtig geschätzt. Unterhalb von 1000 m können die Transporte mit einem glatten Geschwindigkeitsfeld genauer geschätzt werden.

Ein Vergleich der Kovarianzen des Zirkulationsmodells und des inversen Modells zeigt, dass Letzteres die horizontalen Korrelationen der Transportschätzungen im Einklang mit den Referenzwerten schätzt. Die vertikalen Korrelationen können nur zum Teil reproduziert werden. Unter dem Einfluss der Nebenbedingung des verschwindenden Gesamttransportes werden Fehlschätzungen von Transporten durch Teilregionen nicht vertikal, zum Beispiel durch Verschiebung von Dichteflächen, sondern horizontal durch Anpassung des barotropen Geschwindigkeitsfeldes kompensiert. Im Gegensatz zum Zirkulationsmodell ist der Floridastrom statistisch fast vollständig von den übrigen Transporten des hydrographischen Schnittes entkoppelt. In der Floridastraße bestimmen die Geschwindigkeitsmessungen den Transport. Unter dem Vorbehalt, dass hier getestet wurde, wie das inverse Modell den mittleren Zustand eines Modellozeans und *nicht* des realen Ozeans schätzen kann, sind die Übereinstimmungen der Schätzungen mit den Referenzwerten zum größen Teil konsitent mit den Modellannahmen. Der Glattheit der Geschwindigkeit kann in dem hier gewählten Gebiet mit starken horizontalen Gradienten in den westlichen Randströmen keine physikalische Interpretation zugeordnet werden. Sie führt meist zu einer Verschlechterung der Schätzung. Die Erwartung, dass ein glatteres Geschwindigkeitsfeld als zeitlicher Mittelwert interpretiert werden kann, erweist sich daher als trügerisch. Dennoch ist die Unterschätzung der einzelnen Transporte durch ihre horizontale Antikorrelation teilweise kompensiert, so dass die horizontale Summe der Transporte richtig geschätzt wird.

In den Experimenten dieses Kapitels konnte gezeigt werden, dass die Schätzung eines mittleren Zustands aus Hydrographie und Oberflächenauslenkung durch das inverse Modell dieser Arbeit möglich ist. Wenn die vorhandenen Messungen der Oberflächenauslenkung aber sehr genau werden, zeichnen sich die Defizite eines stationären geostrophischen Modells der Ozeanzirkulation ab. Eine konsequente Berücksichtigung der Modellfehler bei der Anpassung an die Daten, die hier nicht durchgeführt wurde, würde auch in diesem Fall zu konsistenten Ergebnissen führen. Allerdings würden durch zusätzliche a priori Fehler auch die a posteriori Fehler der Modelllösung ansteigen. Aus diesem Blickwinkel betrachtet können die hier aus den Experimenten NOSSHA, EGM96A und GRACEA gewonnenen Schätzungen der Transporte und ihrer Fehler als Größenordnung der Genauigkeit interpretiert werden, mit der prinzipiell ein stationäres geostrophisches Modell einen mittleren Zustand aus einer synoptischen in situ Messung schätzen kann. Will man die Schätzung des Ozeanzustands darüber hinaus in dem Maße verbessern, wie es durch die erwartete Genauigkeit des GOCE Geoidmodells möglich sein wird, werden komplexere Modelle der Ozeanzirkulation in Verbindung mit den genauen Daten notwendig sein.

Kapitel 6

Analyse des WOCE Schnittes SR3

Der antarktische Zirkumpolarstrom (Antarctic Circumpolar Current = ACC) ist eine der wichtigsten Komponenten des globalen Strömungssystems. Er spielt eine große Rolle bei dem Austausch der Wassermassen zwischen den drei großen Ozeanbecken des Atlantiks, des Pazifiks und des Indischen Ozeans. Dennoch kennt man seinen dynamischen Aufbau nur ungenügend aus Theorie und Messungen (Rintoul *et al.*, 2000). Schätzungen der durch ihn transportierten (Wasser-)Massen sind nur eingeschränkt möglich, da es schwierig ist, die für die dynamische Methode so wichtige Referenzgeschwindigkeit zu bestimmen. Solche Schätzungen aus hydrographischen Daten zusammen mit Verankerungsmessungen von Geschwindigkeit und Bodendruck wurden von Callahan (1971), Gordon (1975), Whitworth und Peterson (1985), Read und Pollard (1993) und anderen durchgeführt. Am zuverlässigsten sind diese Schätzungen in der Drake Passage, deren vergleichsweise geringe Breite Geschwindigkeitsmessungen in annehmbarer horizontaler Auflösung zulässt. Die Schätzungen des Volumentransports durch diesen schmalen Durchlass zwischen Südamerika und der antarktischen Halbinsel rangieren von 98 bis 154 Sv.

Andere Autoren (z.B. Rintoul, 1991; Macdonald, 1998; Sloyan, 1997; Ganachaud, 2000) verwenden inverse Boxmodelle, um die Transporte im globalen oder im südhemisphärischen Kontext zu bestimmen. Diese Methode basiert auf der Erhaltung integraler Größen wie Masse und konservativer Spurenstoffe in großen "Boxen", die von hydrographischen Schnitten eingefasst sind. Yaremchuk *et al.* (2000b) schätzen dagegen Volumen-, Temperatur- und Stofftransporte des ACC aus den hydrographischen Daten des WOCE (World Ozean Circulation Experiment) Schnittes SR3 allein mit dem Vorläufer des in dieser Arbeit behandelten Modells. Dieser Schnitt zwischen Tasmanien (Australien) und dem antarktischen Schelf ist sehr viel länger als die Drake Passage breit, so dass gar nicht erst der Versuch einer umfassenden Strömungsmessung durch Verankerungen unternommen wurde. So kommen in der Arbeit von Yaremchuk *et al.* nur Geschwindigkeitsdaten einer einzigen Verankerung im Kernbereich des ACC zum Einsatz.

In diesem Kapitel werden ebenfalls Schätzungen des Volumen- und Temperaturtransportes durch den Schnitt SR3 versucht. Im Gegensatz zu Yaremchuk *et al.* soll

Tab. 6.1: Wassermassenklassifizierung durch neutrale Dichte γ_n nach Sloyan und Rintoul (2000a).

TW (Thermoklinenwasser)	$\gamma_n < 26.0 \ \rm kg/m^3$
AAIW (antarktisches Zwischenwasser)	$26.0 \text{ kg/m}^3 < \gamma_n < 27.4 \text{ kg/m}^3$
DW (Tiefenwasser)	$27.4 \text{ kg/m}^3 < \gamma_n < 28.3 \text{ kg/m}^3$
AABW (antarktischen Bodenwasser)	$28.2 \text{ kg/m}^3 < \gamma_n$

aber auf hydrographische Daten aus Wiederholungen des Schnittes verzichtet werden. Stattdessen wird die Differenz zwischen dem Meereshöhenmodell CLS_SHOM98.2 (Hernandez und Schaeffer, 2000) und dem Geoidmodell EGM96 (Lemoine *et al.*, 1997) als Schätzung der Oberflächenauslenkung herangezogen, um die Schätzung der absoluten Geschwindigkeit und damit der Transporte durch den Schnitt zu verbessern.

6.1 Daten

6.1.1 Hydrographie

Das australische Forschungsschiff RSV Aurora Australis befuhr den WOCE "Repeat" Schnitt SR3 im Oktober 1991, März 1993, Januar 1994, Januar 1995, Juli 1995 und im September 1996 (Rosenberg et al., 1995a, 1996, 1995b, 1997). Der SR3 verbindet den australischen Kontinent mit dem Terre Adelié Kontinentalschelf der Antarktis (Abb. 6.1). Auf den Fahrten der RSV Aurora Australis wurden Verteilungen von Temperatur, Salzgehalt, Sauerstoff, Silikat, Nitrat und Phosphat als Teil des australischen Beitrags zum "WOCE World Hydrographic Programme" gemessen. Von den sechs Realisationen des Schnittes wird hier diejenige vom Januar 1994 verwendet (Kennung: AU9407). Temperatur- und Salzgehaltsprofile werden auf 34 Standardtiefen (in 10 bis 100 m Abständen bis 1500 m Wassertiefe und in 250 m Abständen darunter bis 4500 m Wassertiefe) interpoliert. Am Südende des Schnittes liegen die Messstationen eng beieinander. Um die Inhomogenität der horizontalen Auflösung zu reduzieren, werden die Messprofile von zwei Stationen nicht verwendet, deren Abstand zu ihrem jeweiligen nächsten Nachbarn besonders klein ist. Die Messungen der passiven Spurenstoffe (Sauerstoff, Silikat, Nitrat und Phosphat) werden in dieser Untersuchung nicht berücksichtigt. Sie sind zum Teil unvollständig und führten dadurch zu einer erneuten Unterbestimmung des Systems, die an dieser Stelle vermieden werden soll.

Temperatur- und Salzgehaltsverteilung der Reise AU9407 entlang des SR3 sind in Abb. 6.2 zu sehen. Die beiden Frontsysteme der subantarktischen Front (SAF) bei 50– 54°S und der Polarfront (PF) zwischen 54° und 60°S sind zu erkennen. Wassermassen werden in dieser Arbeit nach Sloyan und Rintoul (2000a) durch ihre neutrale Dichte γ_n (Jackett und McDougall, 1997) charakterisiert. Die wichtigsten sind in Tab. 6.1 aufgeführt. Die subtropische Front (STF) liegt in diesem Schnitt bei etwa 46–47°S.



Abb. 6.1: Lage des WOCE Schnittes SR3 und der Stationen der Fahrt AU9407 (Punkte) mit schematischer Darstellung der allgemeinen Zirkulation nach Rintoul *et al.* (2000). SAF bezeichnet das subantarktische Frontsystem, PF die Polarfront(en), EAC den Ost-Australienstrom ("East Australian Current"). COUN ist ein ostwärts gerichteter Gegenstrom. Bereiche mit kleineren Wassertiefen als 3000 m sind grau schattiert.

Sie trennt das salzreiche, warme Thermoklinenwasser von den kälteren, salzärmeren Wassermassen weiter südlich und markiert die nördliche Begrenzung des ACC (Orsi *et al.*, 1995).

Die in Abb. 6.2 dargestellten Daten bilden die erste Schätzung der Modellfelder auf der die Gitterboxen zentral schneidenden vertikalen Ebene. Die Werte der ersten Schätzung auf den Gitterpunkten des inversen Modells (siehe Abb. 2.2) werden durch Extrapolation dieser Datenfelder gewonnen, wobei sie senkrecht zum Schnitt linear gemäß ihres klimatologischen Gradienten ansteigen bzw. abfallen. Der klimatologische Gradient entstammt dem WOCE-SAC Atlas (Gouretski und Jancke, 1998). Er dient gleichzeitig als Hintergrundwert für den Salzgehalts- und Temperaturgradienten senkrecht zum Schnitt.



(b) potentielle Temperatur [°C]

Abb. 6.2: Salzgehalt und Temperatur entlang SR3 im Januar 1994. Der Abstand der durchgezogenen Konturen beträgt 0.1 PSU (1°C). Die gestrichelten Hilfkonturen haben einen Abstand von 0.02 PSU (0.2°C). Die wichtigsten Wassermassen sind das antarktische Bodenwasser (AABW), das Tiefenwasser (DW) und das antarktische Zwischenwasser (AAIW). Das Thermoklinenwasser (TW, nicht eingezeichnet) am nördlichen Rand nahe der Oberfläche ist warm und salzreich. Es wird durch die subtropische Front (STF) von den kälteren und salzärmeren Wassermassen im Süden getrennt. Die Polarfront (PF) ist bei diesem Schnitt stark verbreitert. Ihre nördlichen Ausmaße reichen bis an die subantarktische Front (SAF) heran. Dort befindet sich die größte horizontale Scherung von Temperatur und Salzgehalt.
Die Referenzgeschwindigkeit am Boden erhält die erste Schätzung 0 ± 1 cm/s. Der kleine *a priori* Fehler der Geschwindigkeit am Boden ist aus anderen Arbeiten übernommen (z.B. Macdonald, 1998; Sloyan, 1997). Das aus vertikaler Integration der thermischen Windgleichung gewonnene horizontale Geschwindigkeitsfeld ist in Abb. 6.3 dargestellt. Die Komponente senkrecht zum Schnitt (v) liegt etwa in Ost-West-Richtung. Sie zeigt die großen Strömungssysteme südlich von Tasmanien: den starken ostwärtigen Strom in der subantarktischen Front zwischen 50–54°S und den schwächeren, aber breiteren und ebenfalls ostwärtigen Driftstrom am südlichen Ende des ACC's; die westwärts gerichteten Gegenströmungen über dem tasmanischen Kontinentalabhang und über der Südflanke des mittelozeanischen Rückens bei 54–56°S.

Die horizontale Geschwindigkeit *u* tangential zum Schnitt wird durch den klimatologischen Normalgradienten der Dichte bestimmt. Sie zeigt als größtes Merkmal die nordwärtige Komponente des ACC's, die deutlich weiter südlich liegt als das Maximum der ostwärtigen Komponente in der subantarktischen Front aus den Daten der Fahrt AU9407. Die nach Norden gerichtete Strömung entspricht aber der in Abb. 6.1 dargestellten Vorstellung einer nordwärtigen Schleife der Polarfront und des mit ihr verbundenen Transports.

6.1.2 Mittlere Oberflächenauslenkung

Die Meereshöhe CLS_SHOM98.2 von Hernandez und Schaeffer (2000) ist durch Gauß-Markov Schätzung der mittleren Meereshöhe aus Altimeterdaten der GEOSAT, TOPEX/Poseidon und ERS Missionen gewonnen worden. Sie ist damit ein zeitlicher Mittelwert über die Jahre 1986 bis 1996.

Von der Meereshöhe *h* muss ein Referenzgeoid abgezogen werden, um die dynamisch relevante Oberflächenauslenkung zu erhalten (siehe Kapitel 3). In diesem Kapitel wird dazu das Geoidmodell EGM96 verwendet (Lemoine *et al.*, 1997). Die Fehlerrechnung für dieses Geoidmodell ist bis zum Grad 70 vollständig, so dass dieser Wert als maximale Auflösung des Modells interpretiert wird, obwohl die Geoidkoeffizienten bis Grad und Ordnung 360 vorhanden sind. Abb. 6.4 zeigt die Oberflächenauslenkung $\zeta_{CE} = \text{CLS}$ _SHOM98.2 – EGM96 nach bilinearer Interpolation auf die Koordinaten des WOCE SR3 Schnittes und nach Abbildung durch den Mittelungsoperator \hat{Q}_{ζ} mit Gaußschem Kern mit einem Mittelungsradius von $r = \pi R/70 \approx 286$ km (siehe Kapitel 3). Ferner ist die dynamische Höhe abgebildet, die man nach Integration der thermischen Windgleichung relativ zu einem Referenzdruck von 3000 dbar aus den Messungen von Temperatur und Salzgehalt der Fahrt AU9407 erhält.

Die Fehlerkovarianzmatrix der Oberflächenauslenkung entlang des Schnittes wird entsprechend Kapitel 3 aus den als unkorreliert behandelten Fehlern der Meereshöhe CLS_SHOM98.2 und der Fehlerkovarianzmatrix des Geoidmodells EGM96 bis Grad und Ordnung 180 gewonnen. Dieser Entwicklunggrad entspricht der Auflösung des $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ Gitters, auf dem die Oberflächenauslenkung ζ_{CE} vorliegt. Die Quadratwurzel ihrer Diagonalen ist als Fehler der bilinear interpolierten Daten in Abb. 6.4 dargestellt.



(b) Normalkomponente v [cm/s]

Abb. 6.3: Erste Schätzung des horizontalen Geschwindigkeitsfeldes vor der Minimierung der Kostenfunktion. Konturintervall ist 5 cm/s, grau schattierte Regionen bezeichnen süd- bzw. westwärtige Geschwindigkeit.



Abb. 6.4: A priori Schätzungen der Oberflächenauslenkung. Alle Schätzungen haben den Mittelwert null. Die von einem $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ Grad Gitter bilinear auf den hydrographischen Schnitt SR3 interpolierte Oberflächenauslenkung ζ_{CE} ist mit Fehlern des EGM96 bis Grad und Ordnung 180 versehen (dunkelgrauer "Schlauch"). Die Schätzung aus den hydrographischen Messungen der Fahrt AU9407 ist mit ζ_{CE} fast überall verträglich. Am Nordrand befinden die größten Abweichungen. Dort ist auch die mit \hat{Q}_{ζ} geglättete Oberflächenauslenkung, mit ebenfalls geglätteten Fehlern (hellgrauer "Schlauch"), größer als die dynamische Höhe. Aus der größeren Differenz der Oberflächenauslenkungsdaten zwischen Anfangs- und Endpunkt des Schnittes folgt ein größerer Nettotransport, als man aus der Hydrographie allein schätzen würde.

Innerhalb dieser Schwankungsbreite von bis zu 28 cm sind bilinear interpolierte Daten und dynamische Höhe aus der Hydrographie bis auf den Nordrand des Schnittes miteinander verträglich. Dies entspricht den Ergebnissen von Ganachaud *et al.* (1997), die Oberflächengeschwindigkeiten aus hydrographischen Schätzungen und Oberflächenauslenkungsdaten miteinander vergleichen und für konsistent befinden. Abb. 6.5 zeigt die Fehlerkovarianzmatrix der geglätteten Daten $\hat{Q}_{\zeta}|\zeta_{CE}\rangle$. Die Fehler der langwelligen Komponenten der Daten sind in dieser Darstellung kleiner als 8 cm. Auf den langen Skalen unterscheiden sich aber dynamische Höhe und Daten um mehr als diese 8 cm. Die Daten aus Satellitenaltimetrie liefern also auf diesen Skalen neue Informatio-



Abb. 6.5: Fehlerkovarianzmatrix der geglätteten Oberflächenauslenkung.

nen, die in der Hydrographie nicht enthalten sind. Durch eine Anpassung des Modells an diese Daten ist deshalb eine Veränderung des Nettovolumentransportes durch den Schnitt zu erwarten.

6.1.3 Windantrieb und Topographie

Wie in Kapitel 5 sind die Oberflächenrandbedingungen der Vertikalgeschwindigkeit des inversen Modells aus dem klimatologischen Mittel der Windschubspannung von Trenberth *et al.* (1990) ermittelt. Abb. 6.6 zeigt die Vertikalkomponente der Rotation der Windschubspannung und ihre Standardabweichung. Aufgrund dieser Standardabweichung von $(\mathbf{k} \times \nabla) \tau$ muss die Vertikalgeschwindigkeit die Randbedingung (2.23b) an der Oberfläche nur bis auf $O(\pm 10^{-5} \text{m/s})$ genau erfüllen. Die Abweichung q_{τ} wird in der Kostenfunktion deshalb mit der inversen Varianz von $(\mathbf{k} \times \nabla) (\tau/f) / \rho_0$ gewichtet. Die Schätzung der mittleren Ekmangeschwindigkeit aus der Windschubspannung wird dagegen als exakt angenommen. Die verwendete Ekmantiefe von 40 m entspricht einem vertikalen Austauschkoeffizienten von $O(10^3 \text{cm}^2/\text{s})$.

Die Neigung der Bodentopographie wird durch finite Differenzen aus dem Topographiedatensatz ETOPO5 (NOAA, 1988) berechnet und auf das Modellgitter inter-



Abb. 6.6: $(\mathbf{k} \times \nabla) \tau$ aus Trenberth *et al.* (1990) mit grau schattierter Standardabweichung, interpoliert auf die Stationen von SR3.

poliert. Die so erhaltenen lokalen Gradienten werden als sehr ungenau betrachtet. Die Abweichung der Vertikalgeschwindigkeit von der Bodenrandbedingung (2.23a) wird demzufolge mit der horizontalen Varianz der Neigung sehr schwach gewichtet (siehe Kapitel 2).

6.2 Ergebnisse

In Tab. 6.2 sind die insgesamt vier Experimente, die in diesem Kapitel diskutiert werden, zusammengefasst. In den zwei Experimenten NOSSH und NOSSHG wird der Ozeanzustand entlang der SR3 Schnittes aus der Hydrographie mit den erwähnten a priori Annahmen geschätzt. Gegenüber NOSSH sind in Experiment NOSSHG die Gewichte der Glattheit von Salzgehalt und Temperatur, deren Quellterme q_n und der horizontalen Geschwindigkeit u um den Faktor 10 erhöht. Diese zusätzliche Glattheit reduziert die *a posteriori* Fehler des Systems, wie in Kapitel 5 gesehen. Sie soll so zu einer verbesserten Schätzung führen, deren Temperatur- und Salzgehaltsfelder ein langjähriges Mittel besser repräsentieren. In Kapitel 5 war dies im Vergleich mit dem FLAME-Mittelwert nur bedingt gelungen. Zwar konnten die Fehler der Transportschätzungen durch erhöhte Glattheit reduziert werden, aber gleichzeitig waren diese Schätzungen nicht mit den FLAME-Mittelwerten verträglich. Zur Erklärung wurde dort angeführt, dass die Dichtegradienten der "Messung" kleiner waren als die mittleren Gradienten, so dass durch zu glatte Felder die Transporte systematisch unterschätzt wurden. Eine echte Referenz ist im Falle des SR3 Schnittes nicht vorhanden. Der Vergleich der hydrographischen Felder in Abb. 4.8 auf Seite 62 mit den Werten eines klimatologischen Atlasses legt jedoch die Vermutung nahe, dass klimatologische Fel-

NOSSH	Hydrographie mit Gewichten für Glattheit $W_{\hat{S}C}, W_{\hat{S}q}, W_{\hat{S}u}$
NOSSHG	Hydrographie mit Gewichten für Glattheit $10W_{\hat{S}c}$, $10W_{\hat{S}a}$,
	$10W_{\hat{S}u}$
EGM96	Hydrographie und Oberflächenauslenkungsdaten gewichtet mit
	den Fehlern des EGM96 Geoidmodells bis Grad und Ordnung
	70, Gewichte für Glattheit $W_{\hat{S}C}$, $W_{\hat{S}a}$, $W_{\hat{S}u}$
EGM96G	Hydrographie und Oberflächenauslenkungsdaten gewichtet mit
	den Fehlern des EGM96 Geoidmodells bis Grad und Ordnung
	70, Gewichte für Glattheit $10W_{\hat{S}C}$, $10W_{\hat{S}a}$, $10W_{\hat{S}u}$
	20 DY D u

Tab. 6.2: Zusammenfassung der Experimente mit dem WOCE SR3 Schnitt.

der in dieser Region des Weltozeans sehr viel glatter sind als die quasi-synoptischen Messungen. Die Frage, ob glatte Felder gute Schätzungen eines langjährigen Mittelwertes sind, muss im Verlauf dieses Kapitels erneut beurteilt werden.

In den Experimenten EGM96 und EGM96G wird der Ozeanzustand entlang SR3 mit Hilfe der zusätzlichen Daten der Oberflächenauslenkung geschätzt. Dabei unterscheiden sich diese beiden Experimente genauso wie NOSSH und NOSSHG durch die Gewichte der Glattheitsterme voneinander. In Kapitel 5 konnten die Temperaturtransportschätzungen durch den Einsatz von mit EGM96 Fehlern gewichteten Oberflächenauslenkungsdaten um bis zu 18% verbessert werden. Da hier im Gegensatz zu den Experimenten in Kapitel 5 keine *a priori* Schätzung des Gesamtvolumentransports durch den Schnitt die Lösung mitbestimmt, kann man diese Größenordnung der Fehlerreduktion auch bei Volumentransporten erwarten.

Bei allen Experimenten ist die Zahl der unabhängigen Variablen 6057. Es waren nie mehr als 1000 Iterationen notwendig, um den Betrag des Gradienten der Kostenfunktion um den Faktor 10^{-4} zu reduzieren. Dabei verkleinerte sich die Kostenfunktion um 73% bis 92%. Wie bei den FLAME-Experimenten in Kapitel 5 ist die Kondition der Hessematrix von der Größenordnung O(10⁷).

In den nächsten beiden Abschnitten 6.2.1 und 6.2.2 wird zunächst die Qualität der Lösungen der vier Experimente anhand der Eigenschaften der hydrographischen Felder beurteilt, bevor in Abschnitt 6.2.3 das Geschwindigkeitsfeld und die Volumenund Temperaturtransporte der beiden Experimente NOSSH und NOSSHG beschrieben werden. In Abschnitt 6.2.4 soll schließlich gesondert auf den Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten bei der Inversion eingegangen werden.

6.2.1 Analyse der T-S Beziehungen

Die Glättungsoperatoren in der Kostenfunktion werden auf Flächen konstanter Tiefe ausgewertet. Zusammen mit den übrigen Nebenbedingungen können sie bei der Minimierung der Kostenfunktion direkt Temperatur-, Salzgehalts- und Dichteverteilung



Abb. 6.7: Auf neutralen Dichteflächen gemittelte Abweichung von Temperatur und Salzgehalt der geschätzten von den gemessenen Feldern. Durchgezogene Linie ist Experiment NOSSH, gestrichelte Linie NOSSHG. Die Experimente EGM96 und EGM96G unterscheiden sich in dieser Darstellung nicht von den Experimenten NOSSH und NOSSHG. Die *a priori* zugelassene Schwankungsbreite ist grau schattiert.

verändern. Deshalb können im Prinzip bei der Inversion auch die Beziehungen zwischen Salzgehalt und Temperatur verändert werden, was wiederum zu unrealistischen Wassermassen führen kann. Die vertikalen Korrelationen der Temperatur- und Salzgehaltsverteilung wurden hier jedoch bei der Konstruktion der Gewichtsmatrix W_{mn} für Temperatur und Salzgehalt berücksichtigt, damit bei der Inversion Wassermassen näherungsweise erhalten bleiben. Um zu überprüfen, ob dies auch wirklich der Fall ist, wurden die Abweichungen der geschätzten Felder von den hydrographischen Messungen entlang Flächen konstanter neutraler Dichte (Jackett und McDougall, 1997) gemittelt und in Abb. 6.7 mit der *a priori* Fehlerschätzung von Temperatur und Salzgehalt verglichen. Auf keiner der neutralen Dichteflächen übersteigt die mittlere Differenz die zugelassene Schwankungsbreite. Ebenso ist zu erkennen, dass in den Experimenten NOSSHG und EGM96G Temperatur und Salzgehalt an der Grenze zwischen (oberem) Tiefenwasser (DW) und Zwischenwasser (AAIW) aufgrund der größeren Glattheit der Lösung weiter von der Messung abweichen als in NOSSH und EGM96.



Abb. 6.8: θ -S-Diagramm der entlang Flächen konstanter neutraler Dichte gemittelter Profile von potentieller Temperatur und Salzgehalt. Die θ -S-Beziehungen der Experimente mit erhöhter Glattheit weisen etwas wärmeres und salzreicheres antarktisches Zwischenwasser (AAIW) auf. Hier wurde das Zwischenwasser geringfügig mit dem Tiefenwasser vermischt. Tiefenwasser (DW) und antarktisches Bodenwasser (AABW) werden von allen Experimenten gut wiedergegeben. Ein Unterschied zwischen Experimenten mit und ohne Oberflächenauslenkungsdaten ist in der θ -S Kurve nicht zu erkennen.

Dagegen haben die Oberflächenauslenkungsdaten in dieser Darstellung keinen erkennbaren Einfluss auf die Abweichungen von den hydrographischen Messungen.

In Abb. 6.8 werden die entlang neutralen Dichtehorizonten gemittelten Temperatur- und Salzgehaltsprofile der vier Experimente in einem θ -S-Diagramm mit dem Mittel der Messungen verglichen. Auch hier weichen die θ -S Kurven der beiden Experimente mit erhöhter Glattheitsforderung im Bereich des Zwischenwassers (AAIW) und des oberen Tiefenwassers (DW) weiter von den gemessenen Werten ab als die Experimente NOSSH und EGM96. Die Erwärmung des AAIW kann als leichte horizontale Vermischung interpretiert werden. Abgesehen von diesen kleinen Abweichungen kann die Inversion in allen vier Experimenten jedoch als konsistent betrachtet werden, da durch sie keine neuen Wassermassen entstehen (siehe auch Yaremchuk *et al.*, 2000b). Man kann aber aus den Experimenten NOSSHG und EGM96G auch ableiten, dass zu glatte Felder zu einer Veränderung der Beziehung zwischen Temperatur und Salzgehalt führen können. In den Experimenten NOSSHG und EGM96G ist diese Veränderung aber nicht so groß, dass die Lösungen verworfen werden müssten.

6.2.2 Vergleich mit dem WOCE SAC Atlas

Temperatur und Salzgehalt der Lösungen unterscheiden sich nur wenig zwischen den Experimenten mit und ohne Oberflächenauslenkungsdaten. Deshalb soll hier nur auf die Temperatur- und Salzgehaltsfelder der Experimente NOSSH und NOSSHG eingegangen werden, die in Abb. 6.9 dargestellt sind. In dieser Abbildung sind sie mit der Temperatur- und Salzgehaltsverteilung des WOCE SAC Atlas (Gouretski und Jancke, 1998, gestrichelte Konturlinien) verglichen, deren Normalgradienten bereits als Hintergrundterm in der Kostenfunktion verwendet wurden. Die Werte aus dem Atlas stimmen mit der durch das Modell geschätzten Temperatur- und Salzgehaltsverteilung besser überein als mit der gemessenen Verteilung (vergleiche hierzu auch Abb. 4.8 auf Seite 62). Durch die Inversion konnte die Abweichung zwischen Atlas und Messung von 0.7°C (0.10 PSU) im quadratischen Mittel auf 0.6°C (0.08 PSU) in NOSSH und 0.5 °C (0.07 PSU) in NOSSHG reduziert werden. Diese Annäherung der Modellschätzung an die Werte aus dem klimatologischen Atlas, die durch die Modellannahmen und die Forderung nach Glattheit bedingt ist, geht auf Kosten der Differenz zwischen Modellschätzung und Messung. Diese Differenz vergrößert sich von 0 vor der Inversion auf 0.2°C (0.03 PSU) in NOSSH und 0.3°C (0.05 PSU) in NOSSHG. Im Vergleich mit dem WOCE SAC Atlas erscheint demnach die Forderung nach sehr glatten Lösungen als gerechtfertigt, wenn man längerfristige Mittelwerte schätzen möchte. Nach Hinzunahme der Oberflächenauslenkungsdaten ζ_{CE} reduziert sich die quadratische Abweichung zwischen Modellschätzung und klimatologischem Atlas nur noch um weniger als 0.1°C (0.01 PSU).

6.2.3 Zirkulation und Transportschätzungen

Die Geschwindigkeitsfelder aller Experimente sind in Abb. 6.10 zu sehen. Nach der Inversion ist das horizontale Geschwindigkeitsfeld der ersten Schätzung (Abb. 6.3) von kleinskaligen horizontalen Fluktuationen befreit. Ein Vergleich des Experiments NOSSH mit NOSSHG bzw. EGM96 mit EGM96G zeigt, wie die horizontale Variabilität der Strömung durch erhöhte Gewichte der Glattheit weiter reduziert wird. Dabei stellen sich die eingangs erwähnten Strömungsysteme der verbreiterten Polarfront, der subantarktischen Front und die westwärts gerichteten Strömungen über der Südflanke des mittelozeanischen Rückens bei 54° bis 56°S und zwischen SAF und tasmanischem Schelf als robuste Merkmale der allgemeinen Zirkulation heraus. Ebenso erscheint ein schmaler ostwärtiger Randstrom vor der Küste Tasmaniens in der Inversion stabil. Die mit diesen Regionen verbundenen Transporte von Volumen und Temperatur sind in Tab. 6.3 aufgelistet.



Abb. 6.9: Verteilungen von potentieller Temperatur und Salzgehalt der Experimente ohne Oberflächenauslenkungsdaten (durchgezogene Konturlinien); das Konturintervall beträgt 1 °C für Temperatur und 0.1 PSU für Salzgehalt. Die graue Schattierung kennzeichnet Bereiche mit Temperaturen unter 0 °C. Die gestrichelten Linien stellen die Verteilung der gleichen Größen nach dem WOCE SAC Atlas (Gouretski und Jancke, 1998) dar.



Abb. 6.10: Normalkomponente v der Geschwindigkeit entlang SR3. Konturintervall ist 5 cm/s für $|v| \ge 5$ cm/s und 1 cm/s für |v| < 5 cm/s. Gestrichelte, grau unterlegte Bereiche kennzeichnen westwärtige Geschwindigkeit. Relative Größenordnung und Richtung der tangentialen Geschwindigkeit sind durch "Fahnen" angedeutet. Ein Darstellung der Komponenten der tangentialen Geschwindigkeit findet man in Abb. 6.11.

Volumentransport ϕ_V [Sv]

	TAS	COUN	ACC	SSAF	DRIFT	Summe
NOSSH	0.6 ± 1.0	-15.5 ± 6.7	114.9 ± 6.1	-6.2 ± 3.7	58.5 ± 8.9	152 ± 13
NOSSHG	1.1 ± 0.7	-12.1 ± 6.3	105.4 ± 5.9	-2.8 ± 3.4	53.7 ± 8.6	145 ± 12
EGM96	0.7 ± 1.0	-13.6 ± 6.5	114.6 ± 5.7	-3.6 ± 3.6	67.5 ± 8.4	166 ± 11
EGM96G	1.2 ± 0.7	-11.2 ± 6.1	106.1 ± 5.5	-0.8 ± 3.4	59.8 ± 8.2	155 ± 11

Temperaturtransport ϕ_{θ} [PW]

	TAS	COUN	ACC	SSAF	DRIFT	Summe
NOSSH	0.03 ± 0.04	-0.43 ± 0.13	2.02 ± 0.08	-0.05 ± 0.03	0.30 ± 0.04	1.87 ± 0.15
NOSSHG	0.05 ± 0.03	-0.33 ± 0.12	1.85 ± 0.07	-0.02 ± 0.02	0.29 ± 0.04	1.84 ± 0.14
EGM96	0.03 ± 0.04	-0.38 ± 0.13	2.01 ± 0.08	-0.04 ± 0.03	0.35 ± 0.04	1.97 ± 0.14
EGM96G	0.05 ± 0.03	-0.30 ± 0.11	1.86 ± 0.07	-0.01 ± 0.02	0.32 ± 0.04	1.92 ± 0.13

Tab. 6.3: Volumen- und Temperaturtransport (relativ zu 0 °C) durch SR3. TAS bezeichnet den schmalen Randstrom vor der tasmanischen Küste, COUN den Gegenstrom südlich des Kontinentalabhanges, ACC den Zentralbereich des Antarktischen Zirkumpolarstroms in der subantartischen Front. SSAF steht für den westwärts gerichteten Strom südlich der subantarktischen Front und DRIFT für den breiten Driftstrom zwischen 50°S und dem Antarktischen Schelf.

Der ostwärtige Randstrom ist etwa 50 bis 100 km breit und transportiert nur etwa 1 ± 1 Sv. Im Gegensatz zur Schätzung von Yaremchuk *et al.* (2000b) ist der Strom hier durch den kleineren Fehler als signifikant von null verschieden zu betrachten. Yaremchuk *et al.* berichten von Beobachtungen durch Driftbojen und Infrarotmessungen von Satelliten, die diese Einschätzung unterstützen.

Die Annahme erhöhter Glattheit in NOSSHG reduziert die ost- und westwärts gerichteten Transporte durch die übrigen Regionen sowie den Gesamtvolumentransport. Die Reduktion ist jedoch kleiner als die geschätzten Fehler, so dass sich die Transporte von NOSSH und NOSSHG innerhalb ihrer Fehler nicht unterscheiden. Die Ausnahme bildet der Kernbereich des ACC, wo die Fehlerbalken der beiden Schätzungen aus Experiment NOSSH und NOSSHG sich gerade noch überlappen. Dabei entspricht ein schwächerer ACC von 105.4 ± 5.9 Sv in NOSSHG einer Schätzung von Yaremchuk et al. (2000b), die aus fünf Wiederholungen der hydrographischen Messungen einen Transport von 107 ± 25 Sv schätzen. Der stärkere ACC von 114.9 ± 6.1 Sv in Experiment NOSSH ist deutlich größer als die entsprechende Schätzung durch Yaremchuk et al. von 102 ± 15 Sv im Januar 1994. Im Kernbereich des ACC liegt die einzige von Yaremchuk et al. verwendete Strömungsmessung. Sie stellt aber ein zeitliches Mittel dar, so dass der starke barokline Transport der quasi-synoptischen Hydrographie durch sie vermutlich reduziert wird. Diese Strömungsmessung wurde hier nicht verwendet, wodurch in der Lösung NOSSH der Volumentransport im Kernbereich des ACC größer ist. Ebenso kann der von Yaremchuk et al. beschriebene tiefe Gegenstrom nicht gefunden werden, der dort auf den Einfluss der Strömungsmessung zurückgeführt wird. Dieser Gegenstrom reduziert den Volumentransport.

Die Summe des breiten ostwärtigen Driftstromes DRIFT und des westwärtigen Stromes SSAF über der Südflanke des mittelozeanischen Rückens wird durch die größere Glattheit nur wenig von 52.3 Sv in NOSSH auf auf 50.9 Sv in NOSSHG reduziert. Dem von Rintoul *et al.* (2000) vorgeschlagenen Strömungsmuster in Abb. 6.1 folgend entspricht dies der Verlagerung der nordwärtigen Schleife in der verbreiterten Polarfront nach Osten, bzw. entlang des mittelozeanischen Rückens nach Südosten, so dass die Schleife nicht mehr vollständig durch den Schnitt erfasst wird. Eine derartige Verlagerung des Strömungssystems ließe sich durch saisonale Variabilität erklären und ist nicht von vorneherein auszuschließen.

Formal sind alle Korrelationen zwischen den Volumentransportschätzungen sehr klein. Weder durch den Einfluss größerer Glattheit noch durch Oberflächenauslenkungsdaten übersteigen die absoluten Werte 0.15. Das bedeutet, dass alle Transportschätzungen horizontal statistisch unabhängig sind. Dieses Ergebnis ist insofern nicht überraschend, als der Gesamttransport, anders als in Kapitel 5, nicht *a priori* geschätzt worden ist. Die horizontalen Korrelationen, die durch die Modellgleichungen, insbesondere die advektiven Erhaltungsgleichungen für Temperatur und Salzgehalt, und Glattheitsoperatoren verursacht werden, sind in diesem Fall offenbar vernachlässigbar.

Der Gesamttransport durch den Schnitt SR3 beträgt bei der Schätzung mit "rauhem" Geschwindigkeitsfeld 152 ± 13 Sv und mit "glattem" Geschwindigkeitsfeld

 145 ± 12 Sv. Macdonald (1998), Sloyan und Rintoul (2000a) und Ganachaud (2000) finden an dieser Stelle mit hydrographischen "Sommer"-Daten Transporte, die sich um weniger als die Fehlerschätzungen von den hier ermittelten unterscheiden. Yaremchuk *et al.* (2000b) schätzen ebenfalls im Sommer Werte zwischen 146 und 154 Sv. Aus fünf Wiederholungen des Schnittes (zwei Sommerfahrten, drei Fahrten im Herbst und Winter) erhalten diese Autoren 151 Sv. Auf der Basis dieser Zahlen kann demnach nicht eindeutig entschieden werden, ob die Forderung nach einer glatteren Lösung zu einer besseren Transportschätzung führt.

Die Temperaturtransporte wurden wie in Kapitel 5 relativ zu 0°C berechnet, um sie mit anderen Autoren (Saunders und Thompson, 1992; Macdonald, 1998; Sloyan und Rintoul, 2000b; Yaremchuk *et al.*, 2000b) vergleichen zu können. Die Korrelationen mit den entsprechenden Volumentransporten sind beinahe eins, so dass alle Aussagen, die bisher über die Volumentransporte in Bezug auf die Auswirkung der Glattheit gemacht worden sind, auch für die Temperaturtransporte zutreffen.

Der Gesamttransport von Temperatur relativ zu 0 °C durch den Schnitt beträgt 1.87 ± 0.15 PW in NOSSH und 1.84 ± 0.14 PW in NOSSHG. Diese Schätzungen stimmen innerhalb ihrer Fehlerbalken mit denjenigen von Macdonald (1.73 ± 0.43 PW), Sloyan und Rintoul (1.83 ± 0.01 PW) und Yaremchuk *et al.* (1.5 bis 2.6 PW) überein. Saunders und Thompson (1992) untersuchen die Volumen- und Temperaturtransporte eines diagnostischen Modells des südlichen Ozeans (FRAM, Webb *et al.*, 1991). Sie finden südlich von Tasmanien einen sehr hohen Temperaturtransport relativ zu 0 °C von 2.42 PW, den sie aber mit dem sehr starken ACC des Modells FRAM erklären. Sein Volumentransport in der Drake Passage ist mit 195 Sv um über 60 Sv größer als der allgemein akzeptierte gemessene Wert von Whitworth *et al.* (1982).

Ein Vorteil des hier verwendeten Modells besteht darin, dass das Geschwindigkeitsfeld tangential zum Schnitt konsistent mit der Bodentopographie, mit der Windschubspannung an der Oberfläche, unter Berücksichtigung der potentiellen Vorticity-Erhaltung und der advektiven Erhaltungsgleichung für potentielle Temperatur und Salzgehalt geschätzt wird. Nach der Erfahrung aus Kapitel 4, dass diese Komponenten jedoch nur sehr ungenau bestimmbar sind, sollten die Komponenten u und w nur als grobe Schätzung betrachtet werden. In Abb. 6.10 ist darum die Tangentialkomponente nur durch "Strömungsfahnen" dargestellt, die die relative Größe und die Richtung des Vektorfeldes andeuten. Zur Verdeutlichung der tangentialen Geschwindigkeit sind ihre horizontale Komponente u und ihre vertikale Komponente w in Abb. 6.11 für das Experiment NOSSH einzeln abgebildet.

Südlich von 52°S führt das negative Vorzeichen der Rotation der Windschubspannung (siehe Abb. 6.6) weitgehend zu Auftrieb durch Ekmanpumpen. Das Maximum des Auftriebs von etwa 3 bis 4×10^{-6} m/s fällt zwischen 63° und 64°S mit dem Minimum des Windantriebs ($\mathbf{k} \times \nabla$) τ zusammen. Etwa hier divergiert in diesem Modell auch die horizontale Geschwindigkeit. Die antarktische Divergenz wird gewöhnlich durch den Bereich der dünnsten durchmischten Oberflächenschicht definiert. Gemäß dieser Definition passt die Lage der Divergenz nach der Hydrographie in Abb. 6.2 und auch nach der Lösung des Modells in Abb. 6.9 gut mit dem tangentialen Geschwin-



Abb. 6.11: Komponenten der tangentialen Geschwindigkeit entlang SR3 für Experiment NOSSH. **Oben:** Horizontale Komponente u, Konturintervall ist 0.5 cm/s, nach Süden gerichtete Geschwindigkeit ist grau unterlegt. **Unten:** Vertikalkomponente w, Konturintervall ist 2×10^{-6} m/s, nach unten gerichtete Geschwindigkeit ist grau unterlegt.

digkeitsfeld in Abb. 6.10 und zusammen.

Der Windantrieb ist aber nicht die Ursache für das vertikale Geschwindigkeitsfeld im Bereich des mittelozeanischen Rückens, denn hier wechselt ($\mathbf{k} \times \nabla$) τ das Vorzeichen und nimmt nur sehr kleine Werte an. Dennoch findet man in diesem Bereich große vertikale Geschwindigkeiten von O(10⁻⁵m/s). Die Orientierung des Schnittes ändert sich nördlich von 58°S von nahezu perfekt meridional zu "leicht nach Osten geneigt", so dass hier die Normalgeschwindigkeit v, die nördlich und südlich des mittelozeanischen Rückens nennenswerte Absolutwerte annimmt, zu der meridionalen Komponente der Geschwindigkeit beiträgt. Diese ist wiederum durch die Erhaltungsgleichung für potentielle Vorticity (2.23) mit der vertikalen Scherung der Vertikalkomponente gekoppelt, so dass das Tiefenwasser in dem *nordwestwärts* gerichteten Strom südlich des mittelozeanischen Rückens Wasser *aufsteigt*, über den Rücken bzw. durch seine Durchlässe nach Norden fließt und dort im *südostwärts* gerichteten Kernbereich des ACC wieder *absinkt*. Nahe der Oberfläche ist die Vertikalgeschwindigkeit im ACC jedoch nach oben gerichtet. Im ACC bei 51°S erfährt die Wassersäule also eine vertikale Ausdehnung, die im Modell nur dadurch balanciert werden kann, indem die Randbedingungen angepasst werden. Die korrigierten Randbedingungen implizieren eine größere horizontale Divergenz an der Oberfläche und am Boden, als Windschubspannung und die kinematische Randbedingung $\mathbf{u}_{ref} \cdot \nabla H$ allein erzeugen. Am Boden kann diese Abweichung als Fehler der Bodenneigung interpretiert werden, deren exakte Bestimmung schwierig ist. Die Rotation der Windschubspannung an der Oberfläche hat verglichen mit den Stationsabständen eine sehr grobe Auflösung, die auf das $2.5^{\circ} \times 2.5^{\circ}$ -Gitter des Datensatzes von Trenberth *et al.* (1990) zurückzuführen ist. In diesem Zusammenhang erscheint die Korrektur der Randbedingung an dieser Stelle gerechtfertigt.

Die horizontale Komponente u bestimmt sich in erster Linie aus den klimatologischen Dichtegradienten des WOCE SAC Atlas. Ihre Schätzungen durch das inverse Modell unterscheiden sich nicht wesentlich von den Anfangswerten (Abb. 6.3(a), siehe auch Kapitel 4).

6.2.4 Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten

Nach der detailierten Erläuterung der großräumigen Zirkulation und der Tangentialgeschwindigkeit im letzten Abschnitt wird hier der Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten auf das inverse Modell untersucht. Dazu wurden in Experiment EGM96 und EGM96G die Experimente NOSSH und NOSSHG um die mittlere Auslenkung CLS_SHOM98.2 relativ zum EGM96 erweitert.

Abb. 6.12 zeigt, wie die langwelligen Komponenten der Oberflächenauslenkung in den beiden Experimenten angepasst werden. Wegen der Annahme, dass die horizontale Referenzgeschwindigkeit am Boden bis auf 1 cm/s *a priori* bekannt ist, wird diese Geschwindigkeit durch die verhältnismäßig ungenauen Oberflächenauslenkungsdaten kaum verändert. Die Anpassung der Oberflächenauslenkung ist so gering, dass Modell und Daten sich um mehr als die Datenfehler unterscheiden.

Das inverse Modell kann seine Geschwindigkeit an die von der Oberflächenauslenkung vorgeschriebene geostrophische Oberflächengeschwindigkeit im Prinzip durch Veränderung des Dichtefeldes anpassen. Diese Veränderung kann als Abweichung der Messungen von Temperatur und Salzgehalt von einem glatten mittleren Feld interpretiert werden. Tatsächlich erreicht das Modell die kleinen Veränderungen der Oberflächenauslenkung hin zu dem größeren mittleren Gradienten der Daten hauptsächlich durch Anpassung des oberflächennahen Dichtefeldes (Abb. 6.13). Allerdings hat das Maximum der Dichtedifferenz zwischen den Lösungen NOSSH und EGM96 nur die Größenordnung 0.01 kg/m³, während die Differenz zwischen der glatten Lösung EGM96G und der rauheren Lösung EGM96 etwa zehnmal so groß ist. Die Differenz zwischen glatter und rauher Lösung ist aber eine direkte Konsequenz des Glättungsoperators, der auf Temperatur- und Salzgehaltsverteilung angewandt wird. Die Annahme glatter Temperatur- und Salzgehaltsverteilung modifiziert in diesem Zusammenhang das Dichtefeld effektiver als glatte mittlere Oberflächenauslenkungsdaten.



Abb. 6.12: Anpassung der langwelligen Oberflächenauslenkung an die Daten; die *a priori* Fehler der Daten CLS_SHOM98.2–EGM96 sind durch den grau schattierten Schlauch angedeutet.



Abb. 6.13: Potentielle Dichte relativ zur Oberfläche des Experiments EGM96 (oben) und die Abweichung der Dichte von dieser Verteilung in den Experimenten NOSSH (Mitte, Konturintervall ist 0.001 kg/m³) und EGM96G (unten, Konturintervall ist 0.01 kg/m³). Der Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten auf die Dichte ist etwa um den Faktor 10 kleiner als derjenige der erhöhten Glattheit in EGM96G. Bereiche mit negativen Abweichungen sind grau schattiert.

Die Referenzgeschwindigkeit am Boden wird *a priori* als gut bekannt vorausgesetzt. Wenn man diese Annahme lockert, kann sich das Modell durch eine veränderte barotrope Geschwindigkeitskomponente besser an die Oberflächenauslenkungsdaten anpassen. Bei *a priori* Fehlern von 5 cm/s für die Bodengeschwindigkeit wird dies bereits erreicht, aber als Folge dieser Anpassung vergrößert sich der geschätzte Volumentransport durch den Gesamtschnitt von 152 Sv in NOSSH auf 197 Sv. Dieser Wert liegt weit außerhalb der Schwankungsbreite der in der Literatur angegebenen Transportschätzungen von etwa 100–165 Sv (Rintoul *et al.*, 2000). Aus diesem Grund wurde diese Lösung verworfen und ist hier nicht gezeigt. Da die Messungen des Dichtefeldes präzise sind und die geostrophische Näherung ebenfalls als zuverlässig erscheint, weist das unrealistische Resultat aber darauf hin, dass die auf den Schnitt SR3 interpolierten Auslenkungsdaten den Nettoabfall der Oberfläche entlang des Schnittes und damit den Nettotransport überschätzen. In diesem Zusammenhang erscheinen die *a priori* Fehler der Auslenkungsdaten als zu klein.

Dieser Standpunkt wird durch frühere Studien unterstützt. Untersuchungen mit einem Vorläufer des EGM96 Geoidmodells haben gezeigt, dass sogar im Wellenlängenbereich über 2500 km, in dem das Geoid am besten bekannt ist, die Unterschiede zwischen den Oberflächenauslenkungen von Zirkulationsmodellen, aus Hydrographie und aus Satellitenaltimetrie im quadratischen Mittel weit mehr als 10 cm betragen. Besonders im Bereich des Antarktischen Zirkumpolarstroms können diese Abweichungen sogar 40 cm erreichen (Stammer und Wunsch, 1994; Rapp *et al.*, 1996). Wunsch (1993) und Martel und Wunsch (1993) zeigen mit Hilfe eines inversen Modells für den Nordatlantik, dass dort die Gradienten der Oberflächenauslenkung durch die Daten der Satellitenaltimetrie überschätzt werden. Zugleich ist die *a priori* Fehlerschätzung der Oberflächenauslenkungsdaten um den Faktor 2 zu klein. In jüngeren Arbeiten finden Dobrindt (1999) und LeGrand (2000), dass die Fehlerabschätzungen der Oberflächenauslenkung auch mit den Fehlern des EGM96 Geoidmodells zu klein sind und so im Bereich des Antarktischen Zirkumpolarstroms zu unrealistischen Transportschätzungen durch ihre inversen Modelle führen.

Fu (1996) kommt zu einem anderen Schluss. Bei einem Vergleich der Oberflächenauslenkung aus Satellitenaltimetrie mit der Lösung eines globalen Ozeanzirkulationsmodells und der dynamischen Höhe eines hydrographischen Atlasses im Südatlantik stellt er fest, dass Altimetrie und Modell sehr viel besser übereinstimmen, als Altimetrie und Hydrographie. Der größte Unterschied zwischen Altimetrie und Hydrographie besteht gerade in dem Nettoabfall der Oberflächenauslenkung quer über den ACC. Dabei schätzt Fu den Abfall bei der Hydrographie als zu klein ein, da durch die Mittelung des hydrographischen Datensatzes über einen langen Zeitraum und große Distanzen die horizontalen Gradienten sehr stark geglättet sind. Unglücklicherweise werden keine Angaben zu den geschätzten ACC-Volumentransporten durch das Zirkulationsmodell oder die Hydrographie gemacht, so dass die Einschätzung von Fu nicht anhand dieser Zahlen überprüft werden kann.

Die barotrope Natur der kleinen Dichteänderungen durch Oberflächenauslenkungsdaten ist in der Differenz zwischen den Temperaturfeldern der Experimente



Abb. 6.14: Temperatur- und Salzgehaltsunterschiede zwischen Experiment NOSSH ohne und EGM96 mit Oberflächenauslenkungsdaten, Konturintervall ist 0.005 °C (0.0005 PSU). Grau schattiert sind Bereiche, in denen die Differenz negativ ist.

EGM96 und NOSSH wiederzufinden (Abb. 6.14), während die Differenz der Salzgehaltsfelder innerhalb der Wassersäule einmal das Vorzeichen wechselt. Hier zeigt sich eindrucksvoll, wie aus der Oberflächenauslenkung bei als bekannt vorausgesetzter Modellphysik, insbesondere der Zustandsgleichung für Meerwasser und den *a priori* geschätzten vertikalen Korrelationen von Salzgehalt und Temperatur, Informationen über die vertikale Schichtung gewonnen werden können.

Obwohl die Anpassung des Modells an die Oberflächenauslenkungsdaten nur gering ist, führt sie doch zu deutlichen Veränderungen des Geschwindigkeitsfeldes. Die Summe der Volumentransportschätzungen in Tab. 6.3 ist um 10 bis 14 Sv erhöht. Diese Erhöhung setzt sich in erster Linie aus einem vergrößerten Transport im breiten Driftstrom DRIFT bei gleichzeitig verkleinertem Gegenstrom SSAF zusammen. Da die zusätzliche Glattheit in Experiment EGM96G alle Transporte (bis auf den TAS Transport) reduziert, führt dies zu einer beinahe vollständigen Beseitigung der nordwärtigen Schleife am Nordrand der Polarfront in Abb. 6.1 nach Rintoul *et al.* (2000). Die übrigen Transporte bleiben trotz Oberflächenauslenkungsdaten nahezu unverändert.

In Experiment EGM96 ist der Gesamtvolumentransport mit 166 ± 11 Sv zu hoch.

Die Forderung nach größerer Glattheit kompensiert die Tendenz der Oberflächendaten zu großen Transporten, so dass in EGM96G ein Transport von 155 ± 11 Sv geschätzt wird, der besser mit früheren Schätzungen durch Macdonald (1998), Sloyan und Rintoul (2000a) und Ganachaud (2000) übereinstimmt. Die Frage, ob mit Hilfe der Glattheit bessere Lösungen möglich sind, kann auch hier nicht abschließend geklärt werden. Jedoch erzeugt die Glattheit in diesem Fall mit Oberflächenauslenkung eine realistische Transportschätzung, zu der ein Strömungsfeld gehört, das dem ozeanographischen Vorwissen entspricht.

Durch die Oberflächenauslenkungsdaten können die Fehlerschätzungen der Transporte nur geringfügig reduziert werden. Der größte Einfluss findet sich bei dem Gesamttransport. Auf diesen langen Skalen kann man mit Hilfe von Oberflächenauslenkungsdaten mit den Fehlern des Geoidmodells EGM96 die Transporte um bis zu 15% genauer schätzen als aus Hydrographie allein. Die Annahme verschwindender Bewegung am Boden bestimmt das Strömungsfeld bereits sehr genau, so dass erst durch präzisere Schätzungen der Oberflächenauslenkung mit Hilfe genauerer Geoidmodelle Verbesserungen der Transportschätzungen möglich werden.

Der Auftrieb über der Südflanke des mittelozeanischen Rückens wird unter dem Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten verstärkt. Die Oberflächenauslenkung CLS_SHOM98.2 – EGM96 ist in diesem Sinne mit der Interpretation des nordwärtigen Transports von Wassermassen unterhalb von 1000 m über den mittelozeanischen Rücken konsistent. Die nach Norden gerichtete Bewegung des Tiefenwassers erscheint auch aus topographischen Überlegungen glaubhaft, da sich weiter östlich der mittelozeanische Rücken mit noch geringeren Wassertiefen als großes Hindernis dem tiefen Driftstrom der Polarfront entgegenstellt (Abb. 6.1). Weiter nördlich befindet sich jedoch ein tieferer Durchlass, der durch Überqueren des Rückens westlich von 155°E mit den geringsten Auf- und Abwärtsbewegungen des Tiefenwassers erreicht werden kann.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Die Messung von hydrographischen Parametern wie Temperatur und Salzgehalt entlang von vertikalen Schnitten durch den Ozean hat eine lange Tradition und ist auch heute noch eine der wichtigsten und zuverlässigsten Methoden in der beobachtenden Ozeanographie. Häufig behindert allerdings das Fehlen einer zuverlässigen Referenzgeschwindigkeit die Analyse dieser Daten. In dieser Arbeit wird ein nichtlineares inverses Modell vorgestellt, das aus hydrographischen Daten und Messungen der Oberflächenauslenkung das Geschwindigkeitsfeld unter Berücksichtigung dynamischer Erhaltungsgleichungen schätzt. Dabei kommen Methoden der Variationsrechnung zum Einsatz.

Das Modell wurde auf der Grundlage der Arbeit von Nechaev und Yaremchuk (1995) entwickelt. Es beruht auf der geostrophischen Approximation, der Erhaltung von potentieller Vorticity und der Erhaltung von Spurenstoffen auf der Gitterskala. Im Gegensatz zum Modell von Nechaev und Yaremchuk bestimmt in diesem Modell die linearisierte quasigeostrophische Vorticitygleichung in ihrer ursprünglichen Form die Vertikalgeschwindigkeit. Anders als bei der klassischen dynamischen Methode oder den (mittlerweile auch klassischen) inversen Boxmodellen gehören in dem hier vorgestellten inversen Modell Temperatur und Salzgehalt (sowie passive Spurenstoffe) zu den unabhängigen Variablen. Dadurch wird einerseits der Lösungsraum und damit der Rechenaufwand groß, andererseits erhält man neben dem Geschwindigkeitsfeld auch eine neue, mit den dynamischen Annahmen des Modells konsistente Schätzung für die hydrographischen Felder. Als weitere Verbesserung werden für Temperatur und Salzgehalt in der Kostenfunktion Gewichte eingeführt, die die *a priori* geschätzte vertikale Korrelation der hydrographischen Parameter berücksichtigen. Diese Wahl der Gewichte ermöglicht es, das Modell an die Daten anzupassen, ohne dass unrealistische Wassermassen entstehen.

Zusätzlich zu den hydrographischen Daten werden in dieser Arbeit Messungen der Oberflächenauslenkung durch Satellitenaltimetrie verwendet. Um aus ihnen die geostrophische Oberflächengeschwindigkeit schätzen zu können, müssen die altimetrischen Messungen auf eine Äquipotentialfläche, das Geoid, bezogen werden. Diese Äquipotentialfläche ist bis heute nur ungenügend genau bekannt. Aktuelle Geoidmodelle enthalten Fehler, die auf kurzen Wellenlängen die Größenordnung des zu beobachtenden Signals erreichen. Deshalb beschränkt man sich im Allgemeinen auf die langwelligen Komponenten der Oberflächenauslenkung (Wunsch und Gaposchkin, 1980; Ganachaud *et al.*, 1997). Neue Geoidmodelle, die eine präzise Bestimmung der Äquipotentialfläche bis zu einer Auflösung von 100 km versprechen, befinden sich jedoch in Planung und Vorbereitung.

Die Untersuchungen mit einem kleinen Versuchsdatensatz demonstrieren einige grundsätzliche Eigenschaften des inversen Modells dieser Arbeit. Die Zahl der unabhängigen Variablen ist mehr als doppelt so groß wie die Zahl der Messungen. Weder die verwendeten Erhaltungsgleichungen noch die Forderung nach Glattheit können die mathematische Unterbestimmung des Systems vollständig aufheben. Dies gelingt erst, wenn genügend Messungen des horizontalen Strömungsfeldes vorhanden sind oder, im mathematischen Sinn gleichwertig, wenn man *a priori* Annahmen über die absolute Geschwindigkeit in einer geeigneten Tiefe macht. Zusätzliche Annahmen über die Verteilung der gemessenen Spurenstoffe senkrecht zum Schnitt, die zum Beispiel aus einem klimatologischen Atlas abgeleitet werden können, verbessern die Konditionierung des Problems erheblich.

Durch die geringe Zahl der Versuchsdaten bleibt der technische Aufwand in diesem Teil der Untersuchung überschaubar. Man kann gut erkennen, warum eine vollständige Fehlerrechnung notwendig ist, um die Qualität der Lösung eines inversen Modells zu beurteilen. Denn trotz mathematischer Unterbestimmung kann das Modell Strömungsfelder schätzen, die plausibel erscheinen. Diese Schätzungen sind aber formal wertlos, wie erst die Betrachtung der *a posteriori* Fehler zeigt.

Eingangs wurde die Frage nach dem Verständnisgewinn durch satellitengestützte Messungen der Oberflächenauslenkung gestellt. In diesem Zusammenhang wird in dieser Arbeit vorrangig auf den Einfluss der Messungen der Oberflächenauslenkung auf die Schätzung von Geschwindigkeiten und Transporten eingegangen. Dazu muss zunächst eine Abbildung des zweidimensionalen Datenfeldes auf das eindimensionale Oberflächengitter des Modells gefunden werden, die es erlaubt, das Modell nur auf den von den Daten zuverlässig aufgelösten Skalen anzupassen. Was dabei als zuverlässig gilt, ist *a priori* durch die Fehlerkovarianz der Daten festgelegt. Als eine Möglichkeit für diese Abbildung erweist sich die Singulärwertzerlegung eines Filteroperators mit einer der Gaußschen Glockenkurve ähnlichen Form. Die Abbildung von zwei auf eine Dimension erfordert aber noch eine zusätzliche Annahme: Die Oberflächenauslenkung senkrecht zum Schnitt muss über die betrachtete Längenskala konstant sein. Ein einfaches Beispiel zeigt, dass auch mit dieser Annahme das Problem des Übergangs von zwei auf eine Dimension nur näherungsweise gelöst werden kann.

Zur genaueren Untersuchung des Einflusses der Oberflächenauslenkung auf die Schätzung von Transporten dient ein synthetischer Datensatz, der aus den Ergebnissen der Integration eines Modells der allgemeinen Zirkulation im Nordatlantik besteht. Es zeigt sich, dass der vom inversen Modell geschätzte Zustand entlang eines Schnittes bei 24°N mit den Vergleichsdaten verträglich ist. Die Fehler der Transportschätzungen sind jedoch recht groß. Ferner reduziert eine verstärkte Forderung nach Glattheit zwar die formalen Fehler der Lösung, führt aber gleichzeitig zu großen Abweichungen von der Referenz.

In den Experimenten mit dem synthetischen Datensatz werden die Oberflächenauslenkungsdaten mit unterschiedlichen Fehlerschätzungen gewichtet. Diese Schätzungen entsprechen in ihrer Größe und Auflösung dem aktuellen Geoidmodell EGM96 und den beiden Geoidmodellen, die in der Zukunft aus den Schwerefeldmessungen der Satellitenmissionen GRACE und GOCE entwickelt werden sollen. Die Oberflächendaten selbst werden in allen drei Fällen dem synthetischen Datensatz entnommen. Sie sind damit von den Fehlerschätzungen unabhängig. Die "Messungen" der Oberflächenauslenkung mit den Fehlern der Geoidmodelle GRACE und GOCE verbessern die Schätzung der Transporte um bis zu 55%. Dabei wird auch die Überlegenheit dieser Geoidmodelle gegenüber dem zur Zeit verfügbaren EGM96 deutlich. Mit den Fehlerschätzungen des EGM96 werden die Transportfehler nur um maximal 18% reduziert. Mit den Annahmen des sehr genauen und hochauflösenden Geoidmodells GOCE können die Fehler der oberflächennahen Transporte gegenüber Experimenten mit dem nur auf langen Skalen präzisen Geoidmodell GRACE deutlich verkleinert werden. Allerdings kommt es dabei zu Widersprüchen zwischen Messungen und den Annahmen des inversen Modells. An diesem Punkt werden komplexere Ozeanmodelle notwendig.

Im letzten Kapitel wird der hydrographische Schnitt SR3 des "World Ocean Circulation Experiment" (WOCE) mit dem inversen Modell analysiert. In vier Experimenten erhält man unter verschiedenen Annahmen über die Glattheit und die Oberflächenauslenkung Volumentransporte durch den gesamten Schnitt von 145 bis 166 Sv und Temperaturtransporte von 1.84 bis 1.97 PW. Diese Werte stimmen mit Literaturwerten innerhalb der geschätzten Fehler von 11 bis 13 Sv bzw. 0.13 bis 0.15 PW überein.

Die Experimente mit größeren Gewichten auf der Glattheit der Felder haben Temperatur- und Salzgehaltsverteilungen, die besser mit den Werten eines klimatologischen Atlasses übereinstimmen als die Messungen und als die Verteilungen der Experimente mit schwächerer Forderung nach Glattheit. Der Einfluss der Oberflächenauslenkungsdaten ist dabei mit dem zur Zeit verfügbaren Geoidmodell EGM96 etwa zehnmal kleiner als der Einfluss der stärkeren Forderung nach Glattheit. Wenn man einen mittleren (klimatologischen) Zustand aus quasi-synoptischer Hydrographie schätzen möchte, ist in diesem Sinne die Annahme glatter Felder effektiver als der Einsatz von Oberflächenauslenkungsdaten, die einen echten Mittelwert darstellen.

Ferner stellt sich heraus, dass die Meereshöhe CLS_SHOM98.2 relativ zum Geoidmodell EGM96 sich mit den hydrographischen Daten im Rahmen des inversen Modells nicht verträgt. Die Auslenkungsdaten führen zu einer deutlichen Überschätzung des Volumentransports durch diesen Schnitt. Erst wenn man annimmt, dass die horizontale Geschwindigkeit am Meeresboden *a priori* bis auf 1 cm/s genau bekannt ist, erhält man mit dem Modell mit Oberflächenauslenkungsdaten den Literaturwerten entsprechende Schätzungen des Volumentransports. Dies ist so, weil jetzt die barotrope Geschwindigkeitskomponente nicht zu sehr an die Oberflächenauslenkung angepasst wird. Stattdessen kommt es zu einer leichten Modifikation der hydrographischen Felder, die durch die besonderen Eigenschaften des Modells bedingt ist, nämlich dass Temperatur und Salzgehalt als unabhängige Parameter behandelt werden. Nach der Inversion weichen Modell und Oberflächenauslenkungsdaten allerdings um mehr als die *a priori* Fehler der Daten voneinander ab. Da Hydrographie und geostrophische Approximation nur wenige Unsicherheiten enthalten, muss man annehmen, dass die Oberflächenauslenkungsdaten mit dem schwer zu bestimmenden Geoid die Ursache der Diskrepanzen sind. Hier müssen noch eingehende Untersuchungen durchgeführt werden, zu denen diese Studie Vorarbeiten geleistet hat.

Am Ende der Arbeit sei auf Möglichkeiten hingewiesen, wie man zu einer Verfeinerung der vorgestellten Analyse hydrographischer Schnitte kommen kann.

- Durch die Wahl des Modellgitters und der Gleichungen, insbesondere der Erhaltungsgleichung für Temperatur, Salzgehalt und Spurenstoffe, ist die Zahl der unabhängigen Variablen mehr als doppelt so groß wie die der Messungen. Neben der formalen Unterbestimmung vergrößert sich dadurch auch der Rechenaufwand. Außerdem steht diese Erhaltungsgleichung in ihrer differenziellen Form im Verdacht, für die schlechte Kondition des Problems ($O(10^4)$ bei nur 131 unabhängigen Variablen in Kapitel 4) verantwortlich zu sein (Fiadeiro und Veronis, 1984; Wunsch, 1985). Dies ist der Preis, den man für die Schätzung der tangentialen Geschwindigkeit zahlt. Da gerade diese Schätzung jedoch höchst ungenau ist, erscheint es sinnvoll, die Erhaltungsgleichungen für die hydrographischen Parameter und damit die explizite Behandlung der Tangentialgeschwindigkeit aufzugeben. Dadurch spart man etwa die Hälfte der unabhängigen Variablen und reduziert die Unterbestimmung des Systems erheblich. Stattdessen kann man die gesparte Rechenzeit dazu verwenden, nach dem Vorbild der klassischen Boxmodelle weitere hydrographische Schnitte einzuführen. Wenn man auf diese Weise abgeschlossene Meeresgebiete bildet, erhält man neue integrale Erhaltungsgleichungen für konservative Größen. Dann wäre auch eine Schätzung der großräumigen Tangentialgeschwindigkeit denkbar. Der Vorteil gegenüber den klassischen Boxmodellen besteht in der Erweiterung der unabhängigen Variablen auf Temperatur und Salzgehalt, durch die Fehler quantifiziert werden können, die durch die Annahme quasi-synoptischer Hydrographie entstehen.
- In der Approximation durch finite Differenzen ist es aufwändig, die Bodentopographie mit genügender Genauigkeit aufzulösen. Wunsch (1996) diskutiert Möglichkeiten, wie "Bodendreiecke" zwischen zwei Stationen unterschiedlicher maximaler Tiefe behandelt werden können. Finite-Elemente Methoden finden seit einiger Zeit ihre Anwendung auch in der Ozeanographie (z.B. Walters, 1987;

Provost und Salmon, 1986; Schlichtholz und Houssais, 1999; Dobrindt, 1999). Ein zweidimensionales vertikales Finite-Elemente-Gitter aus Dreiecken könnte das Problem der Bodendreiecke elegant lösen und ermöglichte auch sonst eine flexible Anpassung an die hydrographischen Gegebenheiten des behandelten Schnittes.

- Die Auswertung des Glattheitsoperators auf Tiefenhorizonten ist problematisch, denn glatte Felder sind eher entlang Flächen konstanter neutraler Dichte zu erwarten, da die Vermischung entlang dieser Flächen am effektivsten ist. Auch hier brächte die Behandlung eines Schnittes mit der Finite-Elemente Methode Vorteile, da ein in der Horizontalen unstrukturiertes Gitter schon *a priori* die Dichteverteilung berücksichtigen könnte.
- Die Aufbereitung der Oberflächenauslenkung für ein unregelmäßiges Gitter wie das Messgitter eines hydrographischen Schnittes ist nach wie vor schwierig. Als Hauptproblem erscheint die effektive Filterung der spektralen Bereiche des "Commission"- und "Omission"-Fehlers des Geoidmodells. Filter mit deutlichem Pass- und Stoppband haben eine räumliche Darstellung, die sich über den gesamten Globus erstreckt. Dadurch muss den Landflächen eine "Meereshöhe" zugeordnet werden. Auf eine natürliche Art kann dies nicht geschehen. Auf der anderen Seite haben Filter mit räumlich beschränktem Kern unvorteilhafte spektrale Eigenschaften. Der hier verwendete Filter mit einer der Gaußschen Glockenkurve ähnlichen Form muss als Kompromiss betrachtet werden. Seine starken Dämpfungseigenschaften im Passband unterdrücken jedoch wertvolle Information. Die Untersuchung von Filtermethoden auf der Kugeloberfläche ist hier von hoher Dringlichkeit.
- Die Fehler, die bei der Abbildung von zwei auf eine Dimension auftreten, können reduziert werden, indem weitere hydrographische Schnitte zur "Boxbildung" zu der Analyse hinzukommen und damit dem Modell an der Oberfläche einen zweidimensionalen Charakter geben. In diesem Sinn sind die gewonnenen Erkenntnisse über den Gebrauch von Oberflächenauslenkungsdaten durchaus auf andere (horizontal zweidimensionale) Modelle übertragbar.

Die Analyse hydrographischer Schnitte mit einem inversen Modell ist eine vielseitige und effektive Methode für die Behandlung ozeanographischer Daten. Messungen der Oberflächenauslenkung durch Satellitenaltimetrie können die Methode unterstützen, wenn die Bezugsfläche für diese Daten durch genaue Geoidmodelle gut bekannt ist. In dieser Arbeit wird gezeigt, dass die langwelligen Komponenten der Oberflächenauslenkung, die durch das zur Zeit verfügbare Geoidmodell EGM96 verhältnismäßig gut bekannt sind, bereits zu genaueren Schätzungen von Volumen- und Temperaturtransporten führen können. Neue präzise Geoidmodelle lassen eine deutliche Verbesserung dieser Schätzungen erwarten. Weiter kann man hoffen, dass mit genaueren Geoidmodellen die gegenwärtige Kenntnis der Oberflächenströmungen durch Messungen der Oberflächenauslenkung vervollständigt wird.

Notations- und Abkürzungsverzeichnis

- $\mathbf{u} = (u, v)$: Horizontalgeschwindigkeit
 - w: Vertikalgeschwindigkeit
 - S: Salzgehalt
 - T, θ : in situ Temperatur, potentielle Temperatur relativ zur Oberfläche
 - ρ : *in situ* Dichte
 - $\sigma: \rho 1000$
 - $\sigma_0 = \sigma_{\theta}$: potentielle Dichte relativ zur Oberfläche
 - c_p : spezifische Wärme für Wasser ($\approx 4 \text{ J/kg/°C}$)
 - γ_n : neutrale Dichte nach Jackett und McDougall (1997)
 - ϕ_V, ϕ_{θ} : Volumen-, Temperaturtransport
 - ζ : Oberflächenauslenkung relativ zum Geoid N (SSH = "Sea Surface Height")
 - h: Meereshöhe über dem Referenzellipsoid
 - N: Höhe des Geoids über dem Referenzellipsoid, Äquipotentialfläche
 - Y_{lm} : Kugelflächenfunktion von Grad l und Ordnung m
 - *R*: mittlerer Erdradius (≈ 6371 km)
 - AABW: antarktisches Bodenwasser
 - AAIW: antarktisches Zwischenwasser ("AntArctic Intermediate Water")
 - ACC: antarktischer Zirkumpolarstrom ("Antarctic Circumpolar Current")
 - ADCP: Acoustic Doppler Current Profiler
 - DW: Tiefenwasser ("Deep Water")
 - ECMWF: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
 - EGM96: Earth Gravity Model 1996, Geoidmodell
 - ERS: European Research Satellite
 - ESA: European Space Agency

- FLAME: Family of Linked Atlantic Model Experiments
 - GOCE: Gravity field and steady state Ocean Circulation Explorer
- GRACE: Gravity Recovery And Climate Experiment
- NOAA: National Oceanic and Atmospheric Administration
- OGCM: Modell der allgemeinen Ozeanzirkulation ("Ocean General Circulation Model")
 - PF: Polarfront
- POSEIDON: "Premier Observatoire Spatial Ètude Intensive Dynamique Ocean et Nivosphere" oder "Positioning Ocean Solid Earth Ice Dynamics Orbiting Navigator"
 - SAF: subantarktische Front
 - STF: subtropische Front
 - TOPEX: Ocean TOPography EXperiment
 - WOCE: World Ocean Circulation Experiment

Literaturverzeichnis

- Anzenhofer, M., Gruber, T., und Rentsch, M. (1996). *Global High Resolution Mean Sea Surface Based on ERS-1 35- and 168-Day Cycles and TOPEX Data*, Band 116 der *Global Gravity Field and Its Temporal Variations*. Springer.
- Balmino, G., Perosanz, F., Rummel, R., Sneeuw, N., Sünkel, H., und Woodworth, P. (1998). European views on dedicated gravity field missions: GRACE and GOCE. An Earth Sciences Division Consultation Document, ESA, ESD-MAG-REP-CON-001.
- Barnard, S., Barnier, B., Beckmann, A., Böning, C. W., Coulibaly, M., DeCuevas, D., Dengg, J., Dieterich, C., Ernst, U., Herrmann, P., Jia, Y., Killworth, P. D., Kröger, J., Lee, M.-M., LeProvost, C., Molines, J.-M., New, A. L., Oschlies, A., Reynaud, T., West, L. J., und Willebrand, J. (1997). DYNAMO, Dynamics of North Atlantic Models. DYNAMO Scientific Report N°3.
- Barnier, B., Siefridt, L., und Marchesiello, P. (1995). Thermal forcing for a global ocean circulation model using a three-year climatology of ECMWF analyses. *Journal of Marine Systems*, **6**, 363–380.
- Battrick, B., Hrsg. (1999). *Gravity Field and Steady-State Ocean Circulation*. ESA SP-1233 (1) The Four Candidate Earth Explorer Core Missions. ESA, c/o ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- Bell, M. J., Forbes, R. M., und Hines, A. (2000). Assessment of the FOAM global data assimilation system for real-time ocean forecasting. *Journal of Marine Systems*, **25**, 1–22.
- Bennett, A. F. (1992). *Inverse Methods in Physical Oceanography*. Cambridge University Press.
- Bersch, M. (1995). On the circulation of the northeastern North Atlantic. *Deep Sea Research*, **42**(9), 1583–1607.
- Bertsekas, D. P. (1982). *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Academic Press, London.
- Bindoff, N. L. und McDougall, T. J. (1994). Diagnosing climate change and ocean ventilation using hydrographic data. *Journal of Physical Oceanography*, **24**, 1137–1152.

- Böning, C. W. und Budich, R. (1992). Eddy dynamics in a primitive equation model: Sensitivity to horizonal resolution and friction. *Journal of Physical Oceanography*, 22, 361–381.
- Boyer, T. P. und Levitus, S. (1997). Objective analyses of temperature and salinity for the word ocean on a 1/4 degree grid. NOAA Atlas Series NESDIS 11, U.S. Gov. Printing Office, Washington, D.C.
- Brankart, J.-M., Carmillet, V., Brasseur, P., Verron, J., Evensen, G., Drange, H., Brusdal, K., van Leeuwen, P.-J., und Halberstadt, G. (1999). Assimilation of remote sensing data in a coupled circulation and ecosystem model for the North Atlantic: The DIADEM project. In OCEANOBS 99, International Conference on the Ocean Oberserving System for Climate, Saint Raphael, France.
- Broecker, W. S. (1987). Unpleasant surprises in the greenhouse? *Nature*, **328**(6126), 123–126.
- Broecker, W. S. (1991). The great ocean conveyor. *Oceanography*, **4**(2), 79–89.
- Bryden, H. L. (1993). Ocean heat transport across 24°N latitude. In G. A. McBean und M. Hantel, Hrsg., *Interactions Between Global Climate Subsystems*, Band 75 der *AGU Geophysical Monograph*, Seiten 65–75. American Geophysical Union, Washington, DC.
- Bryden, H. L., Griffiths, M. J., Lavin, A. M., Millard, R. C., Parrilla, G., und Smethie, W. M. (1996). Decadal changes in water mass characteristics at 24°N in the subtropical North Atlantic Ocean. *Journal of Climate*, **9**, 3162–3186.
- Callahan, J. E. (1971). Velocity structure and flux of the Antarctic Circumpolar Current south of Australia. *Journal of Geophysical Research*, **76**(C24), 5859–5864.
- de las Heras, M. M. und Schlitzer, R. (1999). On the importance of intermediate water flows for the global ocean overturning. *Journal of Geophysical Research*, **104**(C7), 15515–15536.
- Defant, A. (1941). Quantitative Untersuchungen zur Statik und Dynamik des Atlantischen Ozeans. Die absolute Topographie des physikalischen Meeresniveaus und der Druckflächen sowie die Wasserbewegungen im Raum des Atlantischen Ozeans. In Wissenschaftliche Ergebnisse der Deutschen Atlantischen Expedition auf dem Forschungs- und Vermessungsschiff "Meteor", Band 6:2, Seiten 191–260.
- Dietrich, G., Kalle, K., Krauss, W., und Siedler, G. (1975). *Allgemeine Meereskunde*. Gebrüder Borntraeger, Berlin, Stuttgart.
- Dobrindt, U. (1999). *Ein Inversmodell für den Südatlantik mit der Methode der finiten Elemente*. Dissertation, Universität Bremen.
- Dombrowsky, E., LeGrand, P., Le Provost, C., Le Traon, P.-Y., Losch, M., Ponchaut, F., Schröter, J., Sloyan, B., und Sneeuw, N. (1999). Impact of the GOCE mission for ocean circulation studies. Technical Report 13175/98/NL/GD, ESA/ESTEC.

- Douglas, B. C. und Cheney, R. E. (1990). Geosat: Beginning a new era in satellite oceanography. *Journal of Geophysical Research*, **95**(C3), 2833–2836.
- Douglas, B. C., McAdoo, D. C., und Cheney, R. E. (1987). Oceanographic and geophysical applications of satellite altimetry. *Reviews of Geophysics*, **25**(5), 875–880.
- Fahrbach, E., Rohardt, G., und Krause, G. (1992). The Antarctic Coastal Current in the southeastern Wedell Sea. *Polar Biology*, **12**, 171–182.
- Fahrbach, E., Rohardt, G., Schröder, M., und Strass, V. (1994). Transport and structure of the Weddell Gyre. *Annales Geophysicae*, **12**, 840–855.
- Fiadeiro, M. E. und Veronis, G. (1984). Obtaining velocities from tracer distributions. *Journal of Physical Oceanography*, **14**(11), 1734–1746.
- Fofonoff, P. und Millard, R.C., J. (1983). Algorithms for computation of fundamental properties of seawater. Unesco Technical Papers in Marine Science, 53 pp. 44, Unesco.
- Fu, L.-L. (1996). The circulation and its variability of the South Atlantic Ocean: First results from the TOPEX/POSEIDON mission. In G. Wefer, W. H. Berger, G. Sielder, und D. J. Webb, Hrsg., *The South Atlantic: Present and Past Circulation*, Seiten 63– 82, Berlin. Springer.
- Fu, L.-L. und Cheney, R. E. (1995). Application of satellite altimetry to ocean circulation studies: 1987–1994. *Reviews of Geophysics*, **32**, 213–223.
- Fu, L.-L., Christensen, E. J., Yamarone, C. A., Lefebvre, M., Ménard, Y., Dorrer, M., und Escudier, P. (1994). TOPEX/Poseidon mission overview. *Journal of Geophysical Research*, **99**(C12), 24369–24382.
- Fukumori, I. (1995). Assimilation of TOPEX sea level measurements with a reducedgravity, shallow water model of the tropical Pacific Ocean. *Journal of Geophysical Research*, **100**(C12), 25027–25039.
- Ganachaud, A., Wunsch, C., Kim, M.-C., und Tapley, B. (1997). Combination of TOPEX/POSEIDON data with a hydrographic inversion for determination of the oceanic general circulation and its relation to geoid accuracy. *Geophysical Journal International*, **128**, 708–722.
- Ganachaud, A. S. (2000). *Large Scale Oceanic Circulation and Fluxes of Freshwater, Heat, Nutrients, and Oxygen.* Dissertation, Department of Earth, Atmospheric and Planetary Sciences, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA.
- Giering, R. (1999). Tangent linear and Adjoint Model Compiler, Users manual 1.4.
- Gilbert, J. C. und Lemaréchal, C. (1989). Some numerical experiments with variablestorage quasi-Newton algorithms. *Mathematical Programming*, **45**, 407–435.
- Gill, A. E. (1982). *Atmosphere-Ocean Dynamics*, Band 30 der *International Geophysics Series*. Academic Press.

- Gill, P. E., Murray, W., und Wright, M. H. (1988). *Practial Optimization*. Academic Press, Inc., London.
- Gordon, A. L. (1975). An Antarctic oceanographic section along 170°E. *Deep-Sea Research*, **22**(6), 357–377.
- Gouretski, V. V. und Jancke, K. (1998). WOCE Report No. 162/98. Technical Report 3, WHP Special Analysis Center. http://www.dkrz.de/~u241046/SACserver/SACHome.htm.
- Haidvogel, D. B. und Beckmann, A. (1999). Numerical Ocean Circulation Modelling, Band 2 der Series on Environmental Science and Management. Imperial College Press, London.
- Heiskanen, W. A. und Moritz, H. (1967). *Physical Geodesy*. W. H. Freeman and Company, San Francisco and London.
- Hernandez, F. und Schaeffer, P. (2000). Altimetric mean sea surfaces and gravity anomaly maps inter-comparisons. AVISO technical report AVI-NT-011-5242-CLS, CLS, Toulouse, France.
- Hidaka, K. (1940a). Absolute evaluation of ocean currents in dynamic calculations. *Proc. Imp. Acad. Tokyo*, **16**, 391–393.
- Hidaka, K. (1940b). Practial evaluation of ocean currents. *Proc. Imp. Acad. Tokyo*, **16**, 394–397.
- Itzykson, C. und Zuber, J.-B. (1990). *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill, New York.
- Jackett, D. R. und McDougall, T. J. (1997). A neutral density variable for the world's ocean. *Journal of Physical Oceanography*, **27**, 237–263.
- Jekeli, C. (1981). Alternative methods to smooth the Earth's gravity field. Technical Report 327, Department of Geodetic Science and Surveying, Ohio State University.
- Kreyszig, E. (1978). *Introduction Functional Analysis with Applications*. John Wiley & Sons, New York.
- Lanczos, C. (1961). *Linear Differential Operators*. Van Nostrand, Reinhold, New York.
- Le Dimet, F.-X. und Talagrand, O. (1986). Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: Theoretical aspects. *Tellus*, **38A**(2), 97–110.
- LeGrand, P. (2000). Impact of the GOCE gravity mission on ocean circulation estimates: Part I. Volume fluxes in a climatological inverse model of the Atlantic. submitted to *Journal of Geophysical Research*.
- LeGrand, P. und Minister, J.-F. (1999). Impact of the GOCE gravity mission on ocean circulation estimates. *Geophysical Research Letters*, **26**(13), 1881–1884.

- Lemoine, F. G., Smith, D. E., Kunz, L., Smith, R., Pavlis, E. C., Pavlis, N. K., Klosko, S. M., Chinn, D. S., Torrence, M. H., Williamson, R. G., Cox, C. M., Rachlin, K. E., Wang, Y., Kenyon, S. C., Salman, R., Trimmer, R., Rapp, R. H., und Nerem, R. S. (1997). The development of the NASA GSFC and NIMA joint geopotential model. In J. Segawa, H. Fujimoto, und S. Okubo, Hrsg., *Gravity, geoid and marine geodesy*, Band 117, Seiten 461–469, New York. International Association of Geodesy Symposia, Springer.
- Levitus, S. und Boyer, T. (1994). World Ocean Atlas 1994. Volume 2: Oxygen. NOAA Atlas Series, NOAA, Washington D.C.
- Levitus, S., Burgett, R., und Boyer, T. (1994). World Ocean Atlas 1994. Volume 1: Salinity. NOAA Atlas Series, NOAA, Washington D.C.
- Macdonald, A. M. (1998). The global ocean circulation: A hydrographic estimate and regional analysis. *Progress in Oceanography*, **41**, 281–382.
- Macdonald, A. M. und Wunsch, C. (1996). An estimate of the global ocean circulation and heat flux. *Nature*, **382**, 436–439.
- Malanotte-Rizzoli, P., Hrsg. (1996). *Modern Approaches to Data Assimilation in Ocean Modelling*. Elsevier, Amsterdam. 455 pp.
- Martel, F. und Wunsch, C. (1993). Combined inversion of hydrography, current meter data and altimetric elevations for the North Atlantic circulation. *Manuscripta Geodaetica*, **18**, 219–266.
- McGoogan, J. T. (1975). Satellite altimetry applications. *IEEE Transactions: Mirco-wave Theory Technique*, **MTT-23**, 970–978.
- McIntosh, P. C. und Rintoul, S. R. (1997). Do box inverse models work? *Journal of Physical Oceanography*, **27**(2), 291–308.
- Nechaev, D. A. und Yaremchuk, M. I. (1995). Application of the adjoint technique to processing of a standard section data set: World Ocean Circulation Experiment section S4 along 67°S in the Pacific Ocean. *Journal of Geophysical Research*, **100**(C1), 865–879.
- Nerem, R. S. *et al.* (1994). Gravity model development for TOPEX/Poseidon: Joint gravity models 1 and 2. *Journal of Geophysical Research*, **99**, 24421–24447.
- NOAA (1988). Digital relief of the surface of the Earth. National Geophysical Data Center, Data Announcement 88-MGG-02, NOAA, Boulder, CO.
- Oreskes, N., Shrader-Frechette, K., und Belitz, K. (1994). Verification, validation, and confirmation of numerical models in earth science. *Science*, **263**(5147), 641–646.
- Orsi, A. H., Whitworth, III, T., und Nowlin, Jr., W. D. (1995). On the meridional extent and fronts of the Antarctic Circumpolar Current. *Deep-Sea Research I*, **42**(5), 641–673.

- Pacanowski, R. (1995). MOM 2 Documentation (User's guide and reference manual). GFDL Ocean Technical Reports 3, Princeton University.
- Pedlosky, J. (1987). Geophysical Fluid Dynamics. Springer, New York. 710 pp.
- Pedlosky, J. (1996). Ocean Circulation Theory. Springer, Berlin. 453 pp.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., und Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in Fortran*. Cambridge University Press, New York.
- Provost, C. und Salmon, R. (1986). A variational method for inverting hydrographic data. *Journal of Marine Research*, **44**, 1–34.
- Rapp, R. H., Zhang, C., und Yi, Y. (1996). Analysis of dynamic ocean topography using TOPEX data and orthonormal functions. *Journal of Geophysical Research*, 101(C10), 22583–22598.
- Read, J. F. und Pollard, R. (1993). Structure and transport of the Antarctic Circumpolar Current and Agulhas return current at 40°E. *Journal of Geophysical Research*, 98(C7), 12281–12295.
- Redler, R., Ketelsen, K., Deng, J., und Böning, C. (1998). A high-resolution numerical model for the circulation of the Atlantic Ocean. In H. Lederer und F. Hertweck, Hrsg., *Proceedings in the Fourth European SGI/CRAY MPP Workshop*, Seiten 95– 108.
- Reed, M. und Simon, B. (1970). *Functional Analysis*. Academic Press, Inc., San Diego.
- Rintoul, S. R. (1991). South Atlantic interbasin exchange. Journal of Geophysical Research, 96(C2), 2675–2692.
- Rintoul, S. R., Hughes, C., und Olbers, D. (2000). The Antarctic Circumpolar Current system. In G. Siedler, J. Church, und J. Gould, Hrsg., *Ocean Circulation and Climate*. Academic Press. to be published.
- Roemmich, D. (1981). Circulation of the Caribbean Sea. *Journal of Geophysical Research*, **86**(C9), 7993–8005.
- Roemmich, D. und Wunsch, C. (1985). Two transatlantic sections: Meridional circulation and heat flux in the subtropical North Atlantic Ocean. *Deep-Sea Research*, **32**, 619–664.
- Rosenberg, M., Eriksen, R., und Rintoul, S. (1995a). Aurora Australis marine science cruise AU9309/AU9391 - oceanographic field measurements and analysis. Antarctic CRC Research Report 2, Antarctic CRC, Hobart, Australia.
- Rosenberg, M., Eriksen, R., Bell, S., Bindoff, N., und Rintoul, S. (1995b). Aurora Australis marine science cruise AU9407 - oceanographic field measurements and analysis. Antarctic CRC Research Report 6, Antarctic CRC, Hobart, Australia.
- Rosenberg, M., Eriksen, R., Bell, S., und Rintoul, S. (1996). Aurora Australis marine science cruise AU9404 - oceanographic field measurements and analysis. Antarctic CRC Research Report 8, Antarctic CRC, Hobart, Australia.
- Rosenberg, M., Bray, S., Bindoff, N., Rintoul, S., Johnston, N., Bell, S., und Towler, P. (1997). Aurora Australis marine science cruise AU9407 - oceanographic field measurements and analysis, intercruise comparisons and data quality notes. Antarctic CRC Research Report 12, Antarctic CRC, Hobart, Australia.
- Sasaki, Y. (1970). Some basic formalisms in numerical variational analysis. *Monthly Weather Review*, **98**, 875–883.
- Saunders, P. M. und Thompson, S. R. (1992). Transport, heat, and freshwater fluxes within a diagnostic numerical model (FRAM). *Journal of Physical Oceanography*, 23(3), 452–464.
- Schlichtholz, P. und Houssais, M.-N. (1999). An inverse modeling study in Fram Strait. Part I: Dynamics and circulation. *Deep-Sea Research II*, **46**, 1083–1135.
- Schott, F. A., Lee, T. N., und Zantopp, R. (1988). Variability of structure and transport of the Florida Current in the period range of days to seasonal. *Journal of Physical Oceanography*, **18**(9), 1209–1230.
- Schwarz, H. R. (1988). Numerische Mathematik. Teubner, Stuttgart.
- Schwintzer, P. *et al.* (1997). Long-wavelength gobal gravity field models: GRIM4-S4, GRIM4-C4. *Journal of Geodesy*, **71**, 189–208.
- Seeber, G. (1989). *Satellitengeodäsie: Grundlagen, Methoden und Anwendungen*. de Gruyter, Berlin, New York.
- Sloyan, B. M. (1997). *The Circulation of the Southern Ocean and the Adjacent Ocean Basins Determined by Inverse Methods*. Dissertation, Institute of Antarctic and Southern Ocean Studies, University of Tasmania.
- Sloyan, B. M. und Rintoul, S. R. (2000a). Estimates of area-averaged diapycnal fluxes from basin-scale budgets. *Journal of Physical Oceanography*. in press.
- Sloyan, B. M. und Rintoul, S. R. (2000b). The Southern Ocean limb of the global deep overturning circulation. *Journal of Physical Oceanography*. in press.
- Stammer, D. und Wunsch, C. (1994). Preliminary assessment of the accuracy and precision of TOPEX/POSEIDON altimeter data with respect to the large-scale circulation. *Journal of Geophysical Research*, **99**(C12), 24584–24604.
- Stammer, D., Wunsch, C., Giering, R., Zhang, Q. K., und Marotzke, J. (1997). The global ocean circulation estimated from TOPEX/POSEIDON altimetry and a general circulation model. Report 49, Center of Global Change Science, Massachusetts Institute of Technology.
- Tapley, B. D. (1997). The gravity recovery and climate experiment (GRACE). *Supplement to EOS Transactions of the American Geophysical Union*, **78**(46), 163.

- Thacker, W. C. (1988a). Fitting models to inadequate data by enforcing spatial and temporal smoothness. *Journal of Geophysical Research*, **93**(C9), 10556–10566.
- Thacker, W. C. (1988b). Three lectures on fitting numerical models to observations. *External Report*, **GKSS 87/E/65**, 64 pp.
- Thacker, W. C. (1989). On the role of the Hessian matrix in fitting models to data. *Journal of Geophysical Research*, **94**(C5), 6177–6196.
- Trenberth, J. M., Olson, J., und Large, W. G. (1990). The mean annual cycle in Global Ocean wind stress. *Journal of Physical Oceanography*, **20**, 1742–1760.
- Tscherning, C. C. und Rapp, R. H. (1974). Closed covariance expressions of gravity anomalies, geoid undulations, and deflections of the vertical implied by anomaly degree variance models. Technical Report 208, The Ohio State University, Department of Geodetic Science.
- Verron, J. (1992). Satellite altimetry for oceanography: from data processing to data assimilation. *Oceanologica Acta*, **15**(5), 409–583.
- Vogeler, A. und Schröter, J. (1999). Fitting a regional ocean model with adjustable open boundaries to TOPEX/POSEIDON data. *Journal of Geophysical Research*, 104(C9), 20789–20799.
- Wahr, J., Molenaar, M., und Bryan, F. (1998). Time variability of the Earth's gravity field: Hydrological and oceanic effects and their possible detection using GRACE. *Journal of Geophysical Research*, **103**(B12), 30205–30299.
- Walters, R. A. (1987). A model for tides and currents in the English Channel and southern North Sea. *Advances in Water Resources*, **10**(3), 138–148.
- Wang, Y.-M. (2000). The satellite altimeter data derived Mean Sea Surface GSFC98. *Geophysical Research Letters*, **27**(5), 701–704.
- Warren, B. A. (1999). Approximating the energy transfer across oceanic sections. *Journal of Geophysical Research*, **104**(C4), 7915–7919.
- Webb, D. J. *et al.* (1991). Using an eddy resolving model to study the Southern Ocean. *EOS*, **72**(15), 169, 174, 175.
- Wenzel, M., Schröter, J., und Olbers, D. (2000). The annual cycle of the global ocean circulation as determined by 4D VAR data assimilation. *Progress in Oceanography*. in press.
- Whitworth, III, T. und Peterson, R. G. (1985). Volume transport of the Antarctic Circumpolar Current from bottom pressure measurements. *Journal of Physical Oceanography*, **15**(6), 810–816.
- Whitworth, III, T., Nowlin, W. D., und Worley, S. J. (1982). The net transport of the Antarctic Circumpolar Current through Drake Passage. *Journal of Physical Oceanography*, **12**(9), 960–971.

- Willebrand, J., Barnier, B., Böning, C., Dieterich, C., Killworth, P. D., LeProvost, C., Jia, Y., Molines, J.-M., und New, A. L. (2000). Circulation characteristics in three eddy-permitting models of the North Atlantic. submitted to *Progress in Oceanography*.
- Worthington, L. V. (1976). On the North Atlantic Circulation. Johns Hopkins University Press, Baltimore.
- Wunsch, C. (1978). The North Atlantic general circulation west of 50° determined by inverse methods. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, **16**, 583–620.
- Wunsch, C. (1984). An eclectic Atlantic Ocean circulation model. Part I: The meridional flux of heat. *Journal of Physical Oceanography*, **14**(11), 1712–1733.
- Wunsch, C. (1985). Can a tracer field be inverted for velocity? *Journal of Physical Oceanography*, **15**(11), 1521–1531.
- Wunsch, C. (1993). Physics of the ocean circulation. In R. Rummel und F. Sansò, Hrsg., Satellite Altimetry in Geodesy and Oceanography, Band 50 der Lecture Notes in Earth Scienes, Seiten 9–98, Berlin. Springer-Verlag.
- Wunsch, C. (1996). *The Ocean Circulation Inverse Problem*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne.
- Wunsch, C. und Gaposchkin, E. M. (1980). On using satellite altimetry to determine the gerneral circulation of the oceans with application to geoid improvement. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, **18**(4), 725–745.
- Wunsch, C. und Stammer, D. (1998). Satellite altimetry, the marine geoid, and the oceanic general circulation. *Annual Reviews of Earth and Planetary Science*, 26, 219–253.
- Wüst, G. (1935). Schichtung und Zirkulation des Atlantischen Ozeans. Das Bodenwasser und die Stratosphäre. In Wissenschaftliche Ergebnisse der Deutschen Atlantischen Expedition auf dem Forschungs- und Vermessungsschiff "Meteor", Band 6:1, 2, Seiten 1–288.
- Yaremchuk, A. I. und Schröter, J. (1998). Spectral analysis of symmetric operators: Application to the Laplace tidal model. *Journal of Computational Physics*, **147**, 1–21.
- Yaremchuk, A. I., Yaremchuk, M., Schröter, J., und Losch, M. (2000a). Local stability and estimation of uncertainty for inverse problem solvers. submitted.
- Yaremchuk, M., Nechaev, D., Schröter, J., und Fahrbach, E. (1998). A dynamically consistent analysis of circulation and transports in the southwestern Wedell Sea. *Annales Geophysicae*, **16**, 1024–1038.
- Yaremchuk, M. I., Bindoff, N. L., Schröter, J., Nechaev, D., und Rintoul, S. R. (2000b). On the zonal and meridional circulation and ocean transports between Tasmania and Antarctica. submitted to *Journal of Geophysical Research*.

Yi, Y. (1995). Determination of gridded mean sea surface from TOPEX, ERS-1 and GEOSAT altimeter data. Technical Report 434, Deptartment of Geodetic Science and Surveying, Ohio State University, Columbus, USA.

Abstract

The recovery of the oceanic flow field from *in situ* data is one of the oldest problems of modern oceanography. In this study, a stationary, non-linear inverse model is developed and described that estimates a geostrophic flow field from hydrographic data along a hydrographic section. The model is augmented to improve these estimates with measurements of the absolute sea surface height by satellite altimetry. The mathematics involved make use of the variational calculus of the adjoint method.

Measurements of the absolute sea surface height include estimates of an equipotential surface, the geoid. Compared to oceanographic measurements, this geoid is known only to low accuracy and spatial resolution, which restricts the use of sea surface height data to applications of large scale phenomena of the circulation. Dedicated satellite missions that will lead to high precision, high resolution geoid models are planned and/or in preparation. In this study, a particular method is presented that allows the use of sea surface height data, that is consistent with its error covariance.

A first test of the model in a scenario with a small data set demonstrates some of the model's characteristics. One has to handle the mathematical under-determination of the model by introducing sufficient prior information about the state of the ocean. This independent information could be taken from a hydrographic atlas.

Twin experiments with a data set taken from a general circulation model of the FLAME group reveal the importance of improved geoid models for estimating the flow field along a hydrographic section. When the sea surface height data is weighted according to the error estimates of the future geoid models GRACE and GOCE integrated transports of volume and temperature can be determined with an accuracy that is improved over the case with no sea surface height data by 55%. With the error estimates of the currently available geoid model EGM96 the reduction of the estimated errors does not exceed 18%.

The inverse model estimates integrated volume transports through the WOCE hydrographic section SR3, one of the choke point sections of the Antarctic Circumpolar Current, of 145–166 Sv. These values agree with the ones found by other authors. The error estimates range from 13 Sv without to 11 Sv with sea surface height data. The sea surface height data is referenced to the EGM96 geoid model and weighted according to its error covariance. Sea surface height data and an estimate of the sea surface height by the model are found to deviate from each other by more than the error estimates.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (AWI) unter der Betreuung von Herrn Prof. Dr. Dirk Olbers und Dr. Jens Schröter angefertigt. Ich bin dankbar, an einem Institut gearbeitet zu haben, das solch gute Voraussetzungen für die Anfertigung einer Dissertation bietet.

Herrn Prof. Dr. Dirk Olbers danke ich für die Anregung und Übertragung dieser Arbeit. Ebenso gebührt mein Dank Herrn PD Dr. Reiner Schlitzer für die zeitaufwendige Erstellung eines Gutachtens. Herr Dr. Jens Schröter unterstützte mich in allen Phasen, die schließlich zu diesem Text geführt haben, und gab mir viele hilfreiche Anregungen. Von seiner Erfahrung habe ich viel profitieren können.

Folgenden Personen gilt mein besonderer Dank dafür, dass sie die Daten zur Verfügung stellten, die ich in dieser Arbeit verwendet habe: Dr. René Redler erstellte den synthetischen Datensatz mit einem Zirkulationsmodell der FLAME Gruppe; Dr. Nico Sneeuw schätzte die Fehler für die noch nicht existierenden Geoidmodelle GRACE und GOCE; daneben trug er entscheidend zu meinem Verständnis der Erde bei, wie sie durch die Augen eines physikalischen Geodäten gesehen wird; Dr. Nathan Bindoff, ich danke ihm auch stellvertretend für andere Vertreter der "messenden Zunft", befuhr den SR3 und erhob die Hydrographie; Dr. Pierre-Yves LeTraon und Dr. Fabrice Hernandez berechneten die mittlere Meereshöhe CLS_SHOM98.2 und beantworteten mir auch viele Fragen; die Gruppe um Dr. Lemoine erzeugte das Geoidmodell EGM96 und machte es im Internet frei verfügbar.

Dr. Ralf Giering, dem Entwickler des TAMC, danke ich für die bereitwillige Unterstützung beim Einsatz seines Programmwerkzeuges nicht weniger als für die Bereitstellung dieses schwer verzichtbaren Hilfsmittels.

Bei Uwe, Alexey, Gennady, Bernadette, Katja, Manfred, Dima, Vladimir, Hartmut, Verena, Sven und Sveta bedanke ich mich für die schöne Arbeitsatmosphäre.

Ein großes Dankeschön geht an Holger, Jan, Christian, Uwe und Heike für Fehlerlesen ohne viel Federlesen.

Heike, Hannah und Nora, ihr habt meine Launen ausgehalten und immer ausreichend für Zerstreuung gesorgt, dafür danke ich euch!

Lebenslauf

PERSÖNLICHE DATEN

Name	: Martin Losch
Geburtsdatum	: 12.06.1969
Geburtsort	: Hamburg
Nationalität	: deutsch
Adresse	: Bürgermeister-Smidt-Str.191, 27568 Bremerhaven

BILDUNGSWEG

1975 – 1989	:	Grundschule und Gymnasium in Nordenham, Schulabschluss: Abitur
1985 - 1986		ΔFS Δ ustauschschüler mit Schulbesuch in Pelham NV US Δ
1705 - 1700	•	A S Austausensenuter mit Senutoesuen mit einam, 101., OSA
1989 – 1990	:	Zivildienst im Allgemeinen Krankenhaus Ochsenzoll, Hamburg
1991 – 1997	:	Student der Physik mit Nebenfach Ozeanographie an der Univer-
		sität Hamburg, Abschluss: Physikdiplom
		Diplomarbeit bei Prof. Zahel mit dem Thema "Datenassimilation
		in ein harmonisches Randmeergezeitenmodell unter Berücksichti-
		gung von nichtlinearen Flachwassereffekten"
Seit 01.09.1997	:	Wissenschaftlicher Angestellter am Alfred-Wegener-Institut für
		Polar- und Meeresforschung in Bremerhaven

VERÖFFENTLICHUNGEN

- Losch, M., Yaremchuk, A., Yaremchuk, M., Schröter, J. und Sloyan, B. (1999). On the estimation of posterior error bars. In *Proceedings of the Third WMO International Symposion on Data Assimilation in Meteorology and Oceanography in Quebec, Canada*.
- Fennel, K., Losch, M., Wenzel, M. und Schröter, J. (2000). Testing a marine ecosystem model: Sensitivity analysis and parameter optimization. *Journal of Marine Systems*, in press.
- Schröter, J., Losch, M. und Sloyan, B. (2000). Impact of the GOCE gravity mission on ocean circulation estimates: Part II. Volume and heat fluxes across hydrographic sections of unequally spaced stations. submitted to *Journal of Geophysical Research*.
- Yaremchuk, A., Yaremchuk, M., Schröter, J. und Losch, M. (2000). Local stability and estimation of uncertainty for inverse problem solvers. submitted.