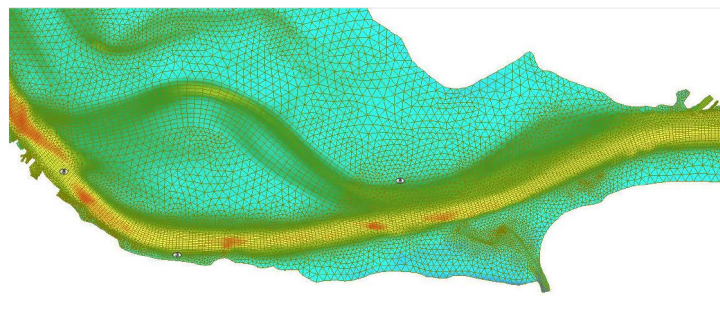


**FuE-Abschlussbericht
Integration D-Flow**

B3955.03.04.70221



August 2023

Zusammenfassung

Der parallele Einsatz unterschiedlicher mathematischer Verfahren (Multi-Modell-Ansatz) für dieselbe Fragestellung, z. B. einer Fahrrinnenanpassung, verbessert die Sicherheit der mit mathematischen Verfahren erstellten Prognosen. Die Modelle sollen treffende Antworten zu den gestellten Fragen liefern und das innerhalb der verfügbaren Zeit. Die Unterschiede zwischen den Modellen in der Art der 2D/3D Diskretisierung der Geometrie, in den unterliegenden numerischen Verfahren oder im Umfang und in der Komplexität der behandelten physikalischen Prozesse bieten mehr Möglichkeiten die erzielten Ergebnisse besser zu verstehen oder kritischer zu betrachten.

In diesem Hinblick wurde das Vorhaben „Integration D-Flow“ in der BAW angestoßen mit dem finalen Ziel, neben UnTRIM ein zweites Simulationsprogramm in das BAW-Entwicklung- und Arbeitsumfeld zu integrieren. D-Flow FM bezeichnet den Rechenkern für die Hydrodynamik innerhalb der Delft3D Flexible Mesh Suite (Delft3D FM). Unter Delft3D FM können Hydrodynamik (inkl. Sturmfluten, Hurrikane, Tsunamis), Wellen, Sedimenttransport und Morphologie, Wasserqualität und Ökologie und deren Wechselwirkungen behandelt werden. Die neue *DeltaShell* Umgebung unter Windows erlaubt eine benutzerfreundliche Aufstellung der Delft3D FM Modelle. Die Simulation selbst kann im Nachhinein unter Linux auf einem Hochleistungsrechner (HLR) für Effizienz Zwecke gestartet werden. Dafür muss die Delft3D FM Suite unter Linux installiert werden. Dieses Vorhaben ist aufwändig, da viele andere (*third-party*) notwendige Bibliotheken mitinstalliert werden müssen. Später wurde die Installationsmethode auf die neue Virtualisierung Technologie *Singularity Container Image* umgestellt, was eine gewisse Vereinfachung des Verfahrens mit sich bringt, da die gesamte Laufzeitumgebung auf dem *Host* virtuell portiert wird und kaum Abhängigkeiten entstehen.

D-Flow FM wurde im ersten Anlauf auf das Untersuchungsgebiet der Tideelbe erprobt. Dabei wurden realistische Szenarien wie z. B. mittlere Verhältnisse simuliert und ausgewertet. Vergleiche mit Messungen für Wasserstand, Strömung und Salzgehalt zeigten gute Übereinstimmungen. Numerisch betrachtet ist D-Flow FM ein Finite-Volumen-Verfahren auf unstrukturierten orthogonalen Gittern basierend auf der semi-impliziten Methode und ist damit sehr ähnlich zu UnTRIM. Vergleiche mit 2D-Ergebnissen aus UnTRIM waren sehr überzeugend. Später wurde ein neueres Elbe-Modell basierend auf der Bathymetrie von 2016 mit einer *Singularity Container Image* Version von D-Flow FM noch einmal gerechnet und ausgewertet. Die erzielten Ergebnisse aus der ersten Studie konnten bestätigt werden.

Um eine weitgehende Kompatibilität mit den BAW-NC-Postprozessoren zu erlangen, wurden die UGRID CF NetCDF Ausgaben von D-Flow FM in Zusammenarbeit mit Deltares angepasst und vereinheitlicht. Die Ergebnisse aus D-Flow FM können nun ohne Modifikation direkt anhand von NCANALYSE, NCDELTA und NCAGGREGATE prozessiert werden.

Eine der wichtigsten und herausforderndsten Aufgabenstellungen während der Kalibrierung und Validierung eines Modells ist die Beschaffung geeigneter Randwerte. Solche Daten werden für kleinskalige Modelle in der Regel aus Messungen bezogen. Für größere Gebiete wie z. B. die Deutsche Bucht werden die Daten aus übergeordneten Modellen wie Nordsee-Modellen geliefert. Deltares betreibt seit einigen Jahren eine Reihe von Nordsee-Modellen, die sich *Dutch Continental Shelf Model* (DCSM) nennen, primär für die operationelle Wassertands-Vorhersage. Die letzten entwickelten Modelle - basierend auf dem D-Flow FM Rechenkern auf unstrukturiertem Gitter -

wurden in der BAW integriert und konnten bereits zuverlässige Randwerte für die Ästuar- und Küstenmodelle - auch für das operationelle Modell GBOM - liefern. Die Ausdehnung, Eigenschaften und Verwendungszweck der implementierten Modelle werden hier erläutert.

Zum Schluss werden Benchmarks zur Bestimmung der Recheneffizienz des D-Flow FM Rechenkerns D-Flow FM auf dem HLR Kronos anhand der Elbe- und DCSSM FM-Modelle diskutiert. Dabei werden auch die Installationsmethoden mit *GNU autoconf build* und *Singularity Container Technology* miteinander verglichen. Die Benchmarks konnten mit bis zu 512 Rechenkernen/MPI Prozesse erfolgreich ausgeführt werden. Die getesteten Modelle zeigten eine gute Skalierung bis zu 256 MPI Prozessen und das für beide Installationsmethoden. Mit mehr Rechenressourcen und gleiche Problemgröße steigt der Kommunikationsaufwand stark, so dass der erzielte Speedup rasch stagniert und sogar sinkt. Für energieeffiziente Berechnungen muss dieser Aspekt betrachtet werden.

Summary

The parallel use of different mathematical methods (multi-model approach) to address the same problem, e.g. a fairway adjustment, improves the reliability of the forecasts made using these mathematical methods. The models should provide accurate answers to the questions posed within the required time. The differences between the models in the type of 2D/3D discretization of the geometry, in the underlying numerical methods or in the scope and complexity of the treated physical processes allow a better understanding and a critical evaluation of the obtained results.

In this regard, the project "Integration D-Flow" was initiated in the BAW with the final goal to integrate a second simulation program in the BAW development and working environment besides UnTRIM. D-Flow FM comes as a computational kernel for hydrodynamics within the Delft3D Flexible Mesh Suite (Delft3D FM). Under Delft3D FM, hydrodynamics (incl. storm surges, hurricanes, tsunamis), waves, sediment transport and morphology, water quality and ecology and their interactions can be handled.

The new *DeltaShell* environment under Windows allows a user-friendly setup of the Delft3D FM models. The simulation itself can be started afterwards under Linux on an HPC for efficiency purposes. For that, the Delft3D FM Suite has to be installed under Linux. This is a time-consuming task since many other (third-party) necessary libraries have to be installed as well. Later, the installation method was changed to the new virtualization technology *Singularity Container Image* which simplifies the procedure to a certain extent since the entire runtime environment is virtually ported to the host system and hardly any dependencies arise.

D-Flow FM was tested on the Elbe in the first run-up. Realistic scenarios such as mean conditions were simulated and evaluated. Comparisons with measurements for water level, current velocity and salinity showed good agreement. Numerically, D-Flow FM is a finite volume method on unstructured orthogonal grids based on the semi-implicit method and is thus very similar to UnTRIM. Comparisons with 2D results from UnTRIM were very convincing. Later, a newer Elbe model based on 2016 bathymetry was recomputed and evaluated using a singularity container image version of D-Flow FM. The obtained results from the first study could be confirmed.

In order to achieve extensive compatibility with the BAW-NC post-processors, the UGRID CF NetCDF outputs of D-Flow FM were adapted and standardized in cooperation with Deltares. The results from D-Flow FM can now be processed directly using NCANALYSE, NCDELTA and NCAGGREGATE without modification.

One of the most important and challenging tasks during the calibration and validation of a model is the acquisition of suitable boundary forcing data. Such data are usually obtained from measurements for the small-scale models. For larger areas such as the German Bight, the data are supplied from large scale models such as North Sea models. Deltares has been running a series of North Sea models called *Dutch Continental Shelf Model (DCSM)* for several years primarily for operational water level forecasting. The last developed models based on the D-Flow FM computational kernel on unstructured grid have been integrated in the BAW with the aim to provide reliable boundary data for the estuarine and coastal models including the operational model GBOM. The extent, properties and intended use of the implemented models are explained here.

Finally, benchmarks for determining the computational efficiency of the D-Flow FM computational core on the BAW High Performance Computer (HPC) system Kronos using the Elbe and DCSM FM models are presented. In the process, the Linux installation methods using GNU autoconf build and Singularity Container Technology are also compared. The benchmarks could be run successfully with up to 512 compute cores/MPI processes. The tested models showed a good scaling up to 256 MPI processes and that for both installation methods. With more computing resources and the same problem size, the communication overhead increases strongly, so that the achieved speedup quickly stagnates and even decreases. This aspect must be considered for energy efficient calculations.

Inhaltsverzeichnis		Seite
1	Einleitung	1
1.1	Aufgabenstellung und Ziel	1
1.2	Bedeutung für die Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung (WSV)	1
1.3	Untersuchungsziel	1
2	Einführung und Installation von D-Flow FM	2
2.1	Anwendungsbereiche	3
2.2	Standardfunktionen	3
2.3	Besondere Merkmale	4
2.4	Numerische Merkmale	5
2.5	Wichtige Unterschiede im Vergleich zu Delft3D-FLOW	6
2.6	Installation	7
2.6.1	Der Linux Autoconf Build	7
2.6.2	Singularity Image Container	8
2.7	Kopplung mit anderen Modulen	9
3	Das Elbe Modell mit der 2006 Bathymetrie	11
3.1	Zielsetzung	11
3.2	Gitternetzzeugung/-Konversion	12
3.3	Modell Kalibrierung: numerische und physikalische Einstellungen	13
3.4	Ergebnisse für mittlere Verhältnisse Juli 2006	14
3.5	Vergleich mit UnTRIM	17
4	Das Elbe Modell mit der 2016 Bathymetrie (Singularity Version)	20
4.1	Zielsetzung	20
4.2	Das Modell	20
4.2.1	Szenario mit M2 Partialtide am offenen Rand	21
4.2.2	Szenario mit den mittleren Verhältnisse im Sommer 2006	28
4.3	Anpassung und Vereinheitlichung der D-Flow FM Ausgaben	30
4.3.1	Tidekennwertanalyse mit dem Post-Prozessor NCANALYSE	33
4.3.2	Aggregation der Ergebnisse mit dem Postprozessor NCAGGREGATE	38
5	Integration des DCSM FM (Dutch Continental Shelf Model Flexible Mesh)	39
5.1	DCSMv6 FM	39
5.1.1	Beispiel-Simulation: Orkan Capella am 1-3 Januar 1976	43
5.1.2	Simulation des Jahres 2007 inkl. Klimaprojektion	46
5.1.3	Das operationelle Modell GBOM mit DCSMv6 FM als Randwertgenerator	46
5.2	DCSM FM 2D und 3D	48
5.2.1	DCSM-FM 0.5nm	49
5.2.2	DCSM-FM 100m	52
5.2.3	Sturmflut Zeynep	53

6	D-Flow FM Benchmarks auf dem Hochleistungsrechner Kronos	57
7	Bewertung und Ausblick	60
8	Literaturverzeichnis	62

Bildverzeichnis	Seite
Bild 1: Das Elbe Modell 2006 in der DeltaShell Benutzer-Oberfläche: Layout und Funktionalitäten des Systems.	10
Bild 2: Topographie des Elbe Modells 2006 in der DeltaShell Benutzer-Oberfläche.	10
Bild 3: Topographie des Elbe Modells 2006 im Mündungsbereich in der „DeltaShell“ Benutzer-Oberfläche. Verwendung der strömungsangepassten Elemente in der Fahrrinne und Dreiecken in den offenen Wattgebieten.	11
Bild 4: Konvertierung eines UnTRIM unstrukturierten Elbe-Gitter anhand der Funktionalität „Import UnTRIM“ von RGFGRID. Die Orthogonalität sowie die „smoothness“ des Gitters werden dabei beibehalten. Weitere Optimierung ggf. notwendig.	12
Bild 5: Verifizierung des eingesteuerten Wassertandes am Pegel Bake A. Vergleich Modell Messungen.	15
Bild 6: Wasserstand am Pegel Cuxhaven (KM 725) für einen Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006 (oben) und für die letzten 10 Tiden (unten). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.	15
Bild 7: Scatter-Plot am Pegel Cuxhaven (KM 725). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.	16
Bild 8: Wasserstand am Pegel St. Pauli (KM 623) für ein Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006 (oben) und für die letzten 10 Tiden (unten). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.	16
Bild 9: Salzgehalt (oben) und Strömungsgeschwindigkeit (unten) an der untersten Schicht am Pegel LZ3 Altenbrucher Bogen (KM 718). Vergleich mit Messungen (2.5 über Sohle) für die letzten 10 Tiden. Gute Übereinstimmung mit Messungen.	17
Bild 10: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel Cuxhaven (KM 725) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.	18
Bild 11: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel LZ3 (KM 718) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.	19
Bild 12: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel St Pauli (KM 623) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.	19
Bild 13: Bathymetrie des Elbe-Modells aus dem Jahr 2016 im Ist-Zustand. Visualisierung mit dem Quickplot-Tool der Delft3D FM Suite.	21

Bild 14:	Nahaufnahme der Bathymetrie an der Elbmündung. Die Tiefen wurden an den Kanten aus dem UnTRIM-Gitter original übernommen. Visualisierung unter DeltaShell.	22
Bild 15:	Elbe-Bathymetrie 2016: Tiefen-Differenzen zwischen dem Ausbau-Zustand (ohne UWA) und dem Ist-Zustand. Gesamtgebiet und Nahaufnahmen an der Mündung und an der Begegnungsbox.	23
Bild 16:	Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe nach einem Monat Simulation für den Ist-Zustand (blau) und Ausbauzustand (Rot) mit dem 3D Modell. Die Kalibrierungsmarke 371 cm am Pegel St. Pauli wurde hier im Ist-Zustand erzielt.	24
Bild 17:	Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe für den Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen 2D und 3D Ergebnisse. Für das 3D Modell wurden 10 Sigma-Schichten verwendet. Unterschiede bis zu 20 cm stromab von Hamburg.	24
Bild 18:	Die Boden-Schubspannung in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit und der Wassertiefe laut dem Mannings-Gesetz. Es gilt hier eine Energie-Dissipation im 3D Fall (Höhe der untersten Modell-Schicht) zu finden, die dem 2D Fall entspricht.	25
Bild 19:	Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe für den Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen 2D und 3D Ergebnisse. Für das 3D Modell wurden 10 Z-Schichten verwendet. die Energie-Dissipation stromauf von Hamburg ist vergleich-bar.	26
Bild 20:	Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe im Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen D-Flow FM und UnTRIM Ergebnisse im 2D Fall.	27
Bild 21:	Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe im Ausbauzustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen D-Flow FM und UnTRIM Ergebnisse im 2D Fall.	28
Bild 22:	Wasserstand am Pegel Cuxhaven (KM 725) für einen Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006. Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen. Visualisierung mit NCPLLOT.	29
Bild 23:	Wasserstand am Pegel St. Pauli (KM 623) für ein Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006. Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen. Visualisierung mit NCPLLOT.	29
Bild 24:	Salzgehalt an der untersten und obersten Schicht am Pegel Cuxhaven (KM 725). Realistische Wiedergabe der vertikalen Schichtung. Vergleichbare Ergebnisse wie die erste Studie (Siehe Bild 9).	30
Bild 25:	mittleres Tideniedrigwasser für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	34

Bild 26:	mittleres Tidehochwasser für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	34
Bild 27:	mittlerer Tidehub für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	35
Bild 28:	Mittelwert der maximalen Ebbestromgeschwindigkeit für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKV-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	36
Bild 29:	Mittelwert der maximalen Flutstromgeschwindigkeit für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKV-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	36
Bild 30:	Mittelwert des minimalen Salzgehaltes für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKS-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	37
Bild 31:	Mittelwert des maximalen Salzgehaltes für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKS-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.	38
Bild 32:	Kontroll-Volumina und Exchanges an der Elbe mit dem Programm NCAGGREGATE. Originale D-Flow FM flächenhaften Ergebnissen wurden prozessiert. Gebiete in Dunkelblau (Nummer 0) sind nicht Bestandteil der Aggregation. Visualisierung mit DAVIT.	39
Bild 33:	Das Berechnungsgitter des DCSMv6 FM mit Nahaufnahme des Kontinentalschelfs. Tiefere Gebiete haben eine gröbere Auflösung. Visualisierung unter DeltaShell.	40
Bild 34:	Bathymetrie des DCSMv6 FM Modell mit Nahaufnahme des Kontinentalschelfs. (Tiefen mit MSL Bezug). Visualisierung unter DeltaShell.	41
Bild 35:	Beispiel für den Betrag der Windgeschwindigkeit U10 aus einem COSMO-EU Datensatz nach der Konvertierung in einem D-Flow FM kompatiblen NetCDF Format.	42
Bild 36:	Wasserstände am Pegel Bake_A und Cuxhaven während Orkan Capella anhand einer DCSMv6 FM Simulation. Kaltstart am 01.01.1976 um 00 Uhr. Die Einschwingzeit beträgt etwa anderthalb Tag.	44
Bild 37:	Hochwasserstand im Simulationszeitraum im gesamten Gebiet gerechnet mit LZKW. Das entspricht dem höchsten Wert der Wasserstände während des Orkans. An der Elbmündung erreichen die Werte bis zu 5 m.	45

Bild 38:	Differenz zwischen dem Hochwasserstand HW und dem Niedrigwasserstand NW im Simulationszeitraum im gesamten Gebiet gerechnet mit LZKW.	45
Bild 39:	Wasserstand am Pegel Terschelling für den Zeitraum 15.10.-04.11.2007. Vergleich mit Messungen (oben). Szenario mit MSL +80 cm am DCSMv6 FM Modellrand (unten).	46
Bild 40:	Flussdiagramm des operationellen Modell GBOM.	47
Bild 41:	Tägliche Vorhersage relevanter Gewässerparameter durch die BAW mit dem operationellen Modell der Deutschen Bucht (GBOM).	48
Bild 42:	Überblick über das DCSM-FM 05nm-Gitternetz. Die Farben stellen die Gittergröße dar (rot: ~4 nm; orange: ~2 nm; hell grün: ~1 nm; blau: ~0,5 nm).	50
Bild 43:	Bathymetrie des DCSM FM05nm Modells. Links: Details der tieferen Gebiete bis 5000 m; Rechts: Details des Kontinentalen-Schelfs ab 800 m. Die Verfeinerung des Gitters wurden annähernd an den Isobathen 800 m, 200 m, 50 m und 12,5 m ausgerichtet.	50
Bild 44:	Detail des DCSM-FM 100m Netzes an der Deutschen Küste, wobei die Farben die Gittergröße angeben. Hellblau: ~1 nm; blau: ~0,5 nm, lila: ~0,25 nm, grau: ~200-100 m.	52
Bild 45:	Vergleich Modell (DCSM-FM 100 m)/Messung der Wasserstände am Pegel Cuxhaven-Steubenhoeft für den Zeitraum 15.02-25.02.2022. Die Sturmflut Zeynep ereignete in der Nacht vom 19. auf den 20. Februar.	54
Bild 46:	Vorhersage des operationellen Modells GBOM an den Pegeln Cuxhaven und St. Pauli für die Sturmflut Zeynep. Die astronomischen Wasserstände, die den mittleren Verhältnissen ähneln wurden auch zum Vergleich geplottet.	55
Bild 47:	Hochwasserstand im Analysezeitraum an der Deutschen Bucht gerechnet mit LZKW. Das entspricht den höchsten Werten der Wasserstände während des Orkans. An der Elbmündung liegen die Werte zwischen 3 und 4 m.	55
Bild 48:	Maximale Strömungsgeschwindigkeit im Analysezeitraum an der Deutschen Bucht gerechnet mit dem Programm NCANALYSE-LZKV. Besonders entlang der Fahrrinne an der Elbmündung treten sehr hohe Geschwindigkeiten auf (> 1.8 m/s).	56
Bild 49:	Betrag der Strömungsgeschwindigkeit mit DCSM-FM 100m am Pegel Scharhörn für den Zeitraum 15.02.-25.02.2022. Der maximale Wert wird während der Sturmflut Zeynep in der Nacht zum 19. Februar beobachtet.	56
Bild 50:	Skalierung verschiedenerer D-Flow FM Modelle auf dem BAW Cluster Kronos. 3D Modelle sind in Sigma-Schichten vertikal aufgelöst. Erzielte Speedup bis zu 512 Rechenkerne.	57
Bild 51:	Skalierung verschiedenerer 3D Elbe D-Flow FM Modelle auf dem BAW Cluster Kronos. Vergleich zwischen der Linux Versionen Autoconf-Build und Singularity Image. Ähnliche Speedup bis zu 256 Rechenkerne. Das 3D Z-	

Schichten Modell mit Salz skaliert hingegen etwas schlechter insbesondere ab
128 MPI Tasks. 59

Tabellenverzeichnis	Seite
Tabelle 1: Methoden zur Bestimmung der Sohlenhöhe im Geschwindigkeitspunkt mit ungleichmäßiger Wassertiefe.	6
Tabelle 2: Wichtige Module der Delft3D Flexible Mesh Suite, die mit dem D-Flow FM Rechenkern gekoppelt werden können.	9
Tabelle 3: Relevante vorhandene Programme und Skripten zur Aufstellung und Bearbeitung von D-Flow FM Modellen in der Delft3D Flexible Mesh Suite.	9
Tabelle 4: Relevante numerische, physikalische und gitterbezogene Einstellungen in der MDU Steuerdatei (Master Definition Unit).	13
Tabelle 5: Eckdaten und Folgen des Orkans Capella am 03.01.1976.	43
Tabelle 6: Übersicht der vorgegebenen Gezeitenkomponenten an den offenen Rändern des DCSM-FM, einschließlich ihrer Winkelfrequenz ($^{\circ}/h$).	51

1 Einleitung

Die Anforderung an unsere Behörde stets den Stand von Wissenschaft und Technik anzuwenden, bedeutet auch, dass eine fortwährende Überprüfung der bisher erzielten Ergebnisse im Lichte von Verbesserungen der eingesetzten Software durchgeführt werden muss. Dazu gehören auch die Einführung und Integration von neuen validierten Systemen, die weitere Möglichkeiten anbieten, unsere komplexen Fragestellungen zu beantworten. In diesem Hinblick wurde das Vorhaben „Integration D-Flow“ in der BAW angestoßen.

1.1 Aufgabenstellung und Ziel

Das mathematische Verfahren Delft3D wird seit 2005 in der BAW-DH eingesetzt. Mit Delft3D können Hydrodynamik und Transport gelöster sowie suspendierter Substanzen, morphologische Änderungen, Seegang sowie verschiedene Wasserqualitäts-Prozesse simuliert werden. Delft3D wird parallel zu den mathematischen Verfahren UNTRIM und UNTRIM2 (mit Sub-Grid) eingesetzt. Die genannten Methoden bilden das Rückgrat praktisch aller für die WSV in der Abteilung Küste der BAW durchgeführten Untersuchungen in Bezug auf Fragestellungen an den Seeschiffahrtstraßen.

Im Gegensatz zu UnTRIM und UnTRIM2, die mit unstrukturierten orthogonalen Gitternetzen genutzt werden, kann Delft3D nur auf strukturierten, krummlinig-orthogonalen Gitternetzen arbeiten. Dies stellt für die geometrisch komplexen Küsten-, Ästuar- und Hafengebiete einen Nachteil dar, da die Erstellung geeigneter Netze nicht immer oder nur mit sehr großem Aufwand möglich ist. Daher arbeitet Deltares seit einigen Jahren (vormals Delft Hydraulics) an einem Nachfolgemodell für Delft3D. Der Arbeitsname ist D-Flow FM. Im Gegensatz zu Delft3D kann D-Flow FM nun auch auf einem unstrukturierten Gitternetz eingesetzt werden. Des Weiteren wird der Code von D-Flow FM in 2014 für ausgewählte Testusers als Open Source zur Verfügung gestellt. Hierdurch können erforderliche Anpassungen oder Erweiterungen durch Mitarbeiter der BAW und von Dritten, z. B. Universitäten, durchgeführt und der Gemeinschaft der D-Flow FM Anwender zur Verfügung gestellt werden. Es ist zu erwarten, dass D-Flow FM eine weite Verbreitung, intensive Anwendung und rasche Weiterentwicklung erfahren wird.

1.2 Bedeutung für die Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung (WSV)

Der parallele Einsatz unterschiedlicher mathematischer Verfahren (Multi-Modell-Ansatz) für dieselbe Fragestellung, z. B. einer Fahrrinnenanpassung, verbessert die Sicherheit und Vertrauenswürdigkeit der mit mathematischen Verfahren erstellten Prognosen.

1.3 Untersuchungsziel

Das in der BAW-DH eingesetzte mathematische Verfahren Delft3D soll durch D-Flow FM ersetzt werden. Hierbei ist D-Flow FM insbesondere mit den in der BAW-DH standardmäßig genutzten Methoden des Pre- und Postprocessing zu verknüpfen. Einheitlich soll das Dateiformat NetCDF in Kombination mit dem CF Metadatenstandard und dessen Erweiterung für unstrukturierte Gitter UGRID benutzt werden. Folgende primäre Ziele sollten erreicht werden:

- Installation der Software, Compilation,
- Vorab-Erprobung „as is“ für die deutschen Ästuarinsbesondere für die Elbe
 - Konversion vorhandener Gitternetze;
 - Betrieb mit vereinfachten Randbedingungen;
 - Prüfen der Ergebnisse, Visualisierung.
- D-Flow FM Schnittstellen anpassen:
 - Import von Anfangswerten aus BAW-Dateien
 - Import von Randwerten aus BAW-Dateien
 - Ausgabe der Simulationsergebnisse in NetCDF Format
- Verknüpfung und Erprobung mit Pre- und Postprocessing der BAW:
 - Gitternetzerzeugung / -Konversion;
 - Analyse der Berechnungsergebnisse (Programm NCANALYSE);
 - Visualisierung der Berechnungsergebnisse (Programme NC PLOT, DAVIT).

Ein weiteres Ziel des Vorhabens neben der Behandlung der fachlichen Inhalte war der Ausbau und die Vertiefung der Zusammenarbeit mit Deltares für einen effizienteren und erfolgreicherem Erfahrungsaustausch. Gleich zum Beginn des Vorhabens bekam die BAW den „Beta-User“ Status und durfte damit schon im Voraus die neuesten Entwicklungen testen, anwenden und Feedbacks liefern. Die vertrauensvolle und effektive Zusammenarbeit mit Deltares ermöglicht es der BAW von der langen und sehr fundierten Expertise von Deltares im Bereich Nordsee-Modellierung zu profitieren. In diesem Rahmen wurde die D-Flow FM basierte DCSM FM (*Dutch Continental Shell Model Flexible Mesh*) Modellfamilie in 2D und 3D auf dem HLR-Kronos portiert und angewendet. Das 2D feinaufgelöste DCSM FM stellt einen sehr wichtigen Baustein in dem BAW-eigenen operationellen Modell GBOM dar.

Der zu Beginn des Projektes aufgestellte Arbeitsplan wurde fast vollständig abgearbeitet und die Ergebnisse dann BAW-intern (TV12 Reihe) und auf der internationalen Veranstaltung *Delft Software Days: Next Generation Hydrodynamics Symposium 2015 - 2022*) über Vorträge kommuniziert. Außerdem, wurde der D-Flow FM Anteil des Vorhabens Herkulis zur Abschätzung der mehrjährigen Variabilität der Sedimenttransportwege in der südlichen Nordsee aktiv unterstützt.

2 Einführung und Installation von D-Flow FM

D-Flow Flexible Mesh (D-Flow FM) ist ein von Deltares entwickeltes hydrodynamisches Simulationsprogramm. Es ist Teil der vollständig integrierten Software *Delft3D Flexible Mesh Suite* oder D-HYDRO Suite für einen multidisziplinären Ansatz und 1D-, 2D- und 3D-Berechnungen für Küstengebiete, Ästuarins und Flüsse. Damit können Simulationen der Hydrodynamik, Strömung, Wellen, Morphologie, Wasserqualität und Ökologie durchgeführt werden.

Es wurde sowohl für Experten als auch für Nicht-Experten entwickelt. Die Delft3D Flexible Mesh Suite besteht aus mehreren Modulen, die um eine gemeinsame Schnittstelle gruppiert sind und in der Lage sind, miteinander zu interagieren.

Das D-Flow FM Modul ist Teil der D-HYDRO Suite für mehrdimensionale (1D, 2D und 3D) hydrodynamische (und Transport-) Simulationen. Der Berechnungskern rechnet instationäre Strömungs- und Transportvorgänge, auf strukturierten und unstrukturierten Gittern, die durch Gezeiten und meteorologischer Antrieb entstehen.

Der Begriff Flexible Mesh im Namen bezieht sich auf die flexible Kombination aus unstrukturierten Gittern bestehend aus Dreiecken, Vierecken, Fünfecken und Sechsecken. In 3D-Simulationen wird der σ -Koordinatenansatz verwendet. Alternativ ist auch ein Ansatz mit festen z-Schichten oder kombinierten σ - und z-Schichten möglich.

Die 2D-Funktionalität in D-Flow FM wurde veröffentlicht, während die Funktionalität für 3D und 1D in Entwicklung stehen.

Weitere detaillierte Informationen befinden sich im *User Manual*.

2.1 Anwendungsbereiche

- Gezeiten- und windgetriebene Strömungen (z. B. Sturmfluten)
- Geschichtete und dichtegesteuerte Strömungen
- Strömungssimulationen
- Ländliche Kanalnetze
- Niederschlagsabfluss in städtischen Umgebungen
- Simulation von Tsunamis, Wechselsprung, Stauwasser und Flutwellen
- Süßwasser-Einträge in Buchten
- Salzintrusion
- Kühlwassereinträge und Abwasserauslässe
- Transport von gelösten Stoffen und Schadstoffen

2.2 Standardfunktionen

- Gezeitenantrieb
- Wirkung der Erdrotation (Corioliskraft)
- Dichtegetriebene Strömungen (Druckgradienten-Terme in den Impulsgleichungen)
- Advektions-Diffusions-Solver zur Berechnung von Dichtegradienten
- Raum und Zeit variierender Wind und atmosphärischer Druck

- Fortgeschrittene Turbulenzmodelle zur Berücksichtigung der vertikalen turbulenten Viskosität und Diffusivität basierend auf dem Wirbelviskositätskonzept. Es werden vier Optionen angeboten:
 1. Konstante
 2. algebraisch
 3. k - ϵ und
 4. k - τ -Modell
- Zeitlich variierende Quellen und Senken (z. B. Flussabflüsse)
- Simulation des thermischen Abflusses, Abwasserabflusses und des Kühlwassereintritts bei jedem Ort und jeder Tiefe
- Robuste Simulation des Trockenfallens und der Überflutung von Wattflächen und Flusswinterbetten

2.3 Besondere Merkmale

- Eingebauter automatischer Schalter, der den 2D-Bodenspannungskoeffizienten in 3D-Koeffizienten umwandelt
- Eingebaute Anti-Kriech-Korrektur zur Unterdrückung künstlicher vertikaler Diffusion und künstlicher Strömung in σ -Gittern
- Wärmeaustausch über die freie Wasseroberfläche
- Welleninduzierte Spannungen und Massenflüsse
- Einfluss von Wellen auf die Sohlschubspannung
- Optionale Möglichkeit zur Berechnung der Intensität der Spiralströmung (z. B. in Flussbiegungen), was besonders bei Sedimentations- und Erosionsuntersuchungen wichtig ist (nur für tiefengemittelte – 2DH – Berechnungen)
- Nichtlineare Iterationen im Solver können für die genauere Berechnung der Flutung aktiviert werden
- Optionale Einrichtung zur Gezeitenanalyse von Ausgabeparametern
- Optionale Einrichtung für Sonderbauwerke wie Pumpwerke, Brücken, feste Wehre und steuerbare Barrieren (1D, 2D und 3D)
- Standard-Advektionsschema, das für verschiedene Strömungssituationen geeignet ist
- Domäne-Partitionierung für parallele Läufe auf MPI-basierten High Performance Computing-Clustern
- Die Ausgaben in D-Flow FM können in verschiedenen Formaten erfolgen. Das relevanteste Ausgabe-Format für die BAW ist das UGRID CF NetCDF Format. Standardmäßig werden zwei Ausgabe-Dateien von Rechenkern geschrieben:

- Die HIS-Ausgabe an vordefinierten Locations und Querschnittprofile
- Die flächenhafte MAP-Ausgabe (auch in 3D)

2.4 Numerische Merkmale

- D-Flow FM ist Massen- und Impulserhaltend und ermöglicht auch Trockenfall und Überflutung
- D-Flow FM implementiert ein Finite-Volumen-Verfahren auf versetzten (staggered) unstrukturierten Gitternetzen
- Die Tiefen in D-Flow FM sind standardmäßig in den Knoten definiert, können aber auch beliebig an anderen Stellen wie z. B. Kanten-Mitte definiert werden
- D-Flow FM benutzt auch die semi-implizite Methode ähnlich wie UnTRIM
- Die Kontinuitätsgleichung wird für alle Elemente implizit in einem einzigen System gelöst
- Im Gegensatz zu UnTRIM, wird die horizontale Advektion explizit diskreditiert. Der Zeitschritt wird dynamisch durch die Courant-Zahl limitiert. Das führt zur Limitierung der numerischen Performanz im Vergleich zum Euler-Lagrange Verfahren
- Die Advektion in D-Flow FM basiert auf dem Ansatz von Perot (2000): Die Geschwindigkeit wird dabei an den Polygonzentren rekonstruiert und dann wieder auf die Kanten interpoliert und in die normale Richtung projiziert
- Die Verwendung von *flux limiters* für Impuls- und Tracers-Transport erlaubt das Erzielen von höherer Ordnung des Verfahrens
- In D-Flow FM kann ein Geschwindigkeitspunkt teilweise überflutet sein und dadurch wird eine graduelle und realistische Überflutung und Trockenfall ermöglicht
- Ein Geschwindigkeitspunkt wird trocken gesetzt, wenn der aktuelle Wasserstand unter die Hälfte eines user-definierten Limits fällt. In dem Fall ist die Geschwindigkeit null. Der Geschwindigkeitspunkt wird wieder feucht, wenn der lokale Wasserstand das definierte Limit überschreitet
- Die Hysterese (Abhängigkeit von der Vorgeschichte des Systems) wird eingeführt um Trockenfallen und Überfluten eines Polygons in zwei konsekutiven Zeitschritte zu verhindern
- D-Flow FM bietet 5 Alternativen für die Bestimmung der Sohlenhöhe im Geschwindigkeitspunkt mit ungleichmäßiger Wassertiefe. In 2D Modellen, die vollständige Methode ist die 2D analytische *Conveyance*

Die MDU (Master Definition Unit) Datei ist die Steuerdatei wo alle Einstellungen inkl. Ausgaben stattfinden.

Tabelle 1: Methoden zur Bestimmung der Sohlenhöhe im Geschwindigkeitspunkt mit ungleichmäßiger Wassertiefe.

Keyword	Value	Cell center bed level	Face center bed level
bedlevtyp	1	user specified	the highest cell center bed level considering the two cells next to the face
bedlevtyp	2	the lowest face center bed level considering all the faces of the cell	user specified
bedlevtyp	3	the lowest face center bed level considering all the faces of the cell	the mean corner bed level considering the two corner nodes the face is connecting
bedlevtyp	4	the lowest face center bed level considering all the faces of the cell	the minimum corner bed level considering the two corner nodes the face is connecting
bedlevtyp	5	the lowest face center bed level considering all the faces of the cell	the maximum corner bed level considering the two corner nodes the face is connecting
bedlevtyp	6	the mean corner bed level considering all the corners of the cell	the highest cell center bed level considering the two cells next to the face

2.5 Wichtige Unterschiede im Vergleich zu Delft3D-FLOW

Der wichtigste Unterschied zwischen Delft3D-FLOW und D-Flow FM ist die Verwendung von unstrukturiertem Gitter. Große Bereiche, die mit den klassischen Vierecken, können nun mit viel größerer Freiheit mit Dreiecken, Vierecken, Fünfecken und Sechsecken dargestellt werden. Gitterverfeinerung oder Vergrößerung ohne *Domain-Decomposition* ist nun in ein und demselben Modellraster möglich. In Zukunft werden 1D- und 2D-Netzwerke entweder nebeneinander oder übereinander gekoppelt werden (das 1D-Netzwerk liegt dann das über dem 2D-Gitter).

Schließlich sind viele der Rasterbeschränkungen von Delft3D-FLOW jetzt weg: da es kein echtes Raster gibt 'Zeilen' und 'Spalten' mehr, Zeilen von Gitterzellen können in beliebiger Richtung mit Spalten gekoppelt werden und an jeder Stelle.

Zusätzlich zu den unstrukturierten Grid-Dateien werden alle geometrischen Modelleingaben jetzt in geografischen Koordinaten angegeben, entweder in kartesischen oder sphärischen Koordinaten (x, y oder Längengrad, Breitengrad). Dies unterscheidet sich von Delft3D-FLOW, das eine Modelleingabe in Rasterindizes erforderte. Diese sogenannte modellunabhängige Koordinateneingabe ermöglicht den einfachen Wechsel eines Modellgitters, wonach die verbleibenden Modelleingaben gleichbleiben können. Die grafische Benutzeroberfläche von D-Flow FM bietet eine viel leistungsfähigere und integrierte Umgebung zum Einrichten von D-Flow FM-Modellen und zum

Überprüfen von Modelleingaben, z. B. zeitabhängig Antriebe (Randbedingungen und Barrieren-Steuerung). Eine weitere Verbesserung innerhalb der Benutzeroberfläche ist die Verwendung von Skripten zum Ausführen und zur Live-Interaktion mit einem Modell.

Der gekoppelte Betrieb von D-Flow FM mit anderen Modulen wurde um die Echtzeitsteuerung von Wasserbauwerken erweitert.

Wie Delft3D-FLOW implementiert D-Flow FM einen Finite-Volumen-Solver auf einem gestaffelten Gitter. Weil es aber kein Konzept von Zeilen und Spalten gibt, ist auch kein ADI-Solver möglich.

Die Kontinuitätsgleichung wird implizit für alle Punkte in einem einzigen kombinierten System gelöst. Die Zeitintegration wird explizit für einen Teil des Advektionsterms und die resultierende Dynamik durchgeführt: Die Zeitschrittbegrenzung wird automatisch basierend auf dem Courant-Kriterium festgelegt. Die möglichen Leistungs-Nachteile, die sich aus diesem Ansatz ergeben, können oft durch Verfeinerung und Vergrößerung des Rechengitters an den richtigen Stellen behoben werden.

In D-Flow FM ist das Advektionsschema sowohl für unterkritische als auch für kritische Strömungen geeignet. Das Schema ist robust und kann die korrekten Ausbreitungsgeschwindigkeiten von Aufgestautem Wasser (*Bores*) reproduzieren.

2.6 Installation

Die Berechnungskomponenten Von Delft3D FM Suite stehen für Windows und Linux zur Verfügung. Die Windows-Version bietet eine Benutzeroberfläche genannt *DeltaShell* an. Bild 1 zeigt ein Beispiel von *DeltaShell* mit einem BAW-Elbe-Modell.

Unter Linux wurden zwei Methoden für die Installation im Laufe des Projektes durchgeführt.

2.6.1 Der Linux Autoconf Build

Die erste und frühere Methode basiert auf dem klassischen GNU *Autoconf*, *Automake*, *Libtool Build* System. Die Methode ist aufwendig, da viele andere notwendige Bibliotheken mitinstalliert werden müssen. Hier entstehen meistens Kompatibilitätsprobleme im Zusammenhang mit Compiler-Versionen, Betriebssystem und Hardware. Insgesamt werden fünf Bibliotheken angefordert und je nach Bedarf anhand von speziellen Skripten auf Kronos installiert.

MPI steht für *Message Passing Interface* und ist eine standardisierte Programmierschnittstelle zum Austausch von Nachrichten zwischen mehreren Prozessen, auf denen ein paralleles Programm über einen verteilten Speicher läuft. Parallele MPI-Programme sind somit sowohl auf PC-Clustern (hier funktioniert der Austausch der Nachrichten z. B. über TCP), als auch auf dedizierten Parallelrechnern (HLR) ausführbar (hier läuft der Nachrichtenaustausch über ein Hochgeschwindigkeitsnetz wie z. B. das *InfiniBand*). Für die Installation von D-Flow FM wurde die schon auf Kronos vorhandene Intel MPI-Bibliothek (Intel 2018) verwendet.

PETSc steht für *Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*. Die Bibliothek enthält eine umfangreiche Suite skalierbarer paralleler linearer und nichtlinearer Gleichungslöser, ODE-Integratoren und Optimierungsalgorithmen für Anwendungs-codes, die in C, C++, Fortran und

Python geschrieben sind. Darüber hinaus bietet PETSc Unterstützung für die Verwaltung paralleler PDE-Diskretisierungen einschließlich paralleler Matrix- und Vektor-Assembly-Routinen.

Diese Bibliothek ist zwar optional für den Rechenkern, wird aber sehr empfohlen, da ohne sie die Simulationen viel langsamer werden.

METIS ist eine Familie von Programmen zur Partitionierung von unstrukturierten Graphen und Hypergraphen und zur Berechnung von füllungsreduzierenden Ordnungen von dünn besetzten Matrizen.

PROJ ist eine generische Koordinatentransformationssoftware, die räumliche Koordinaten von einem Koordinatenreferenzsystem (CRS) in ein anderes transformiert. Dies umfasst sowohl kartographische Projektionen als auch geodätische Transformationen. Sie wird z. B. von der GDAL Bibliothek verwendet

Shapelib ist eine einfache C-API zum Lesen und Schreiben und aktualisieren von ESRI Shapefiles und der zugehörigen Attributdatei (.dbf).

Diese Libraries werden bei der Kompilierung dynamisch gelinkt. Das dynamische Linken hat gegenüber dem statischen Linken viele Vorteile:

Mehrere Prozesse, die dieselbe Bibliothek nutzen, teilen sich eine einzige Kopie der Bibliothek im physischen Speicher. Dadurch wird Systemspeicher gespart und die Auslagerung reduziert. Das ausführbare Programm ist auch dadurch kleiner. Wenn sich die Funktionen in einer Bibliothek ändern, müssen die Anwendungen, die sie verwenden, nicht neu kompiliert oder gelinkt werden, solange sich die Funktionsargumente, Aufrufkonventionen und Rückgabewerte nicht ändern. Im Gegensatz dazu muss bei statisch gelinktem Objektcode die Anwendung neu gelinkt werden, wenn sich die Funktionen ändern.

Ein möglicher Nachteil der Verwendung von dynamischen Linken ist, dass die Anwendung nicht in sich geschlossen ist, sondern von der Existenz eines separaten Moduls abhängt. Das System beendet Prozesse, die dynamisches Linking verwenden, wenn sie eine Bibliothek benötigen, die beim Prozessstart nicht gefunden wird, und gibt eine Fehlermeldung an den Benutzer aus.

Die geschilderten Abhängigkeiten werden auf Kronos bei jedem Login-Shell anhand eines Skriptes aufgelöst, so dass die ausführbaren Anwendungen von D-Flow FM systemweit vorhanden bleiben.

Die aktuelle Version liegt unter: `/net/themis/system/akprog/fortran/delft3d_suite/dflowfm`

2.6.2 Singularity Image Container

Die zweite und spätere Installationsmethode nutzt die moderne *Singularity Container* Virtualisierung Technologie. Diese Methode ermöglicht es all die Kompatibilitätsprobleme der unterschiedlichen Betriebssysteme, Hardware und Compilers zu umgehen. Hierfür wird die gesamte Laufzeit-Umgebung auf dem Host-System virtuell portiert. In unserem Fall (Portierung auf Kronos) war es noch notwendig die MPI-Implementierung (Intel-2018 Package) vom Host (Kronos) zu verwenden. Das *Singularity Image File (SIF)*, von Deltares, dass die gesamte Laufumgebung der *Delft3D FM Suite* enthält musste noch auf Kronos mit dem SLURM Batch System eingebunden und weitere Einstellungen gefunden werden vor allem hinsichtlich des Interconnects (Siehe Kapitel 6).

Die letzten *SIF* Dateien liegen unter: `/net/themis/system/akprog/fortran/delft3d_suite/sif`

2.7 Kopplung mit anderen Modulen

Die hydrodynamischen Variablen (Strömungsgeschwindigkeit, Wasserstand, Dichte, Salzgehalt, vertikale Viskosität/Diffusivität), die im D-Flow FM-Modul gerechnet werden, stehen als Eingabe für andere Module der *Delft3D Flexible Mesh Suite*.

Tabelle 2: Wichtige Module der Delft3D Flexible Mesh Suite, die mit dem D-Flow FM Rechenkern gekoppelt werden können.

Module	Description
D-Morphology	Kohäsiver und nichtkohäsiver Sedimenttransport
D-Real Time Control	Strömungsgesteuerte Kontrolle hydrodynamischer Strukturen
D-Water Quality (Delwaq)	Wasserqualität
D-Waves (SWAN)	Kurzwellenausbreitung

Für die Nutzung von D-Flow FM sind folgende Programme relevant:

Tabelle 3: Relevante vorhandene Programme und Skripten zur Aufstellung und Bearbeitung von D-Flow FM Modellen in der Delft3D Flexible Mesh Suite.

Module	Description
User Interface (DeltaShell)	Benutzeroberfläche für die Aufstellung und den Betrieb des Modells
RGFGRID	Erzeugung krummliniger und unstrukturierter Gitter
Delft3D-QUICKPLOT	Visualisierung und Animation von Simulationsergebnissen
OpenEarthTools	MATLAB Skripts zur Postprozessierung der Ausgabedaten http://www.openearth.eu
DFMOUTPUT	Zusammenführen partitionierter 2D/3D-Daten (merging) sowie Ausgabe abgeleiteter Eigenschaften, z. B. des Maximalwerts einer Zeitreihe

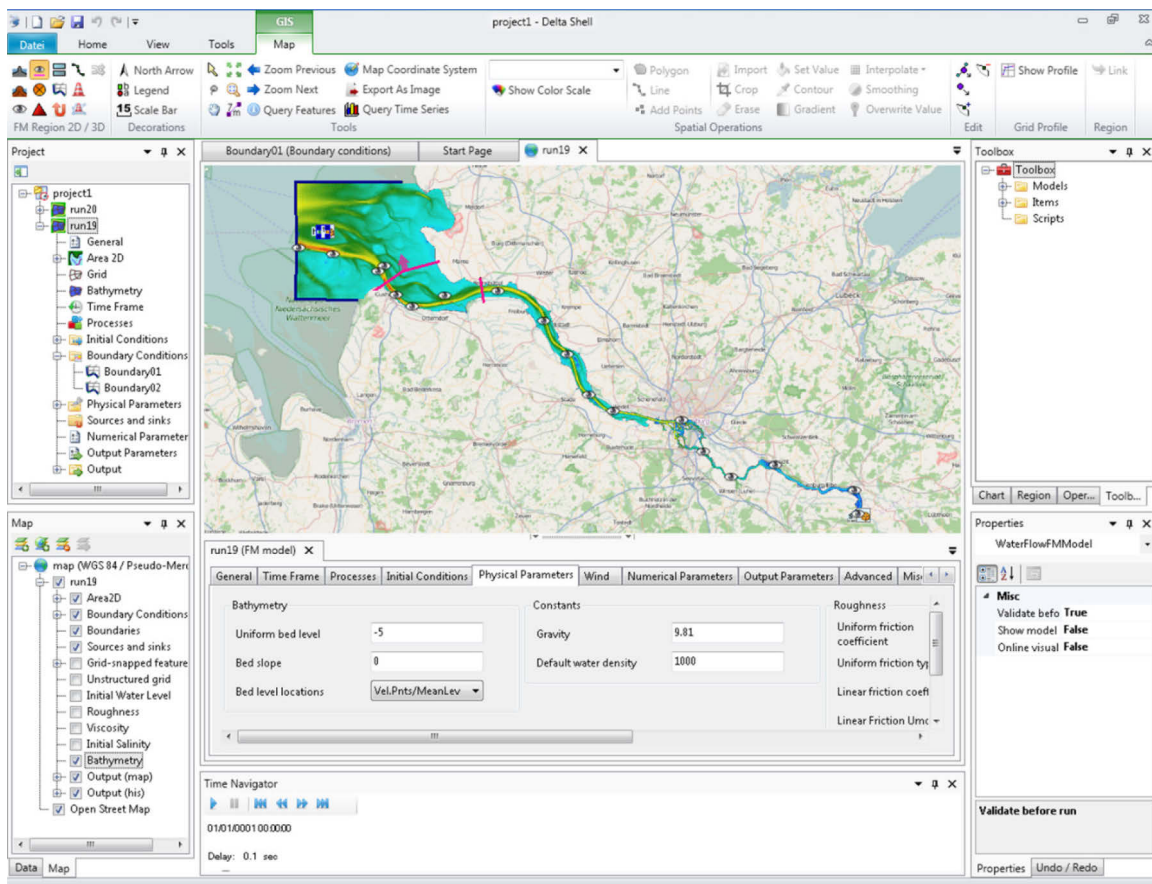


Bild 1: Das Elbe Modell 2006 in der DeltaShell Benutzer-Oberfläche: Layout und Funktionalitäten des Systems.

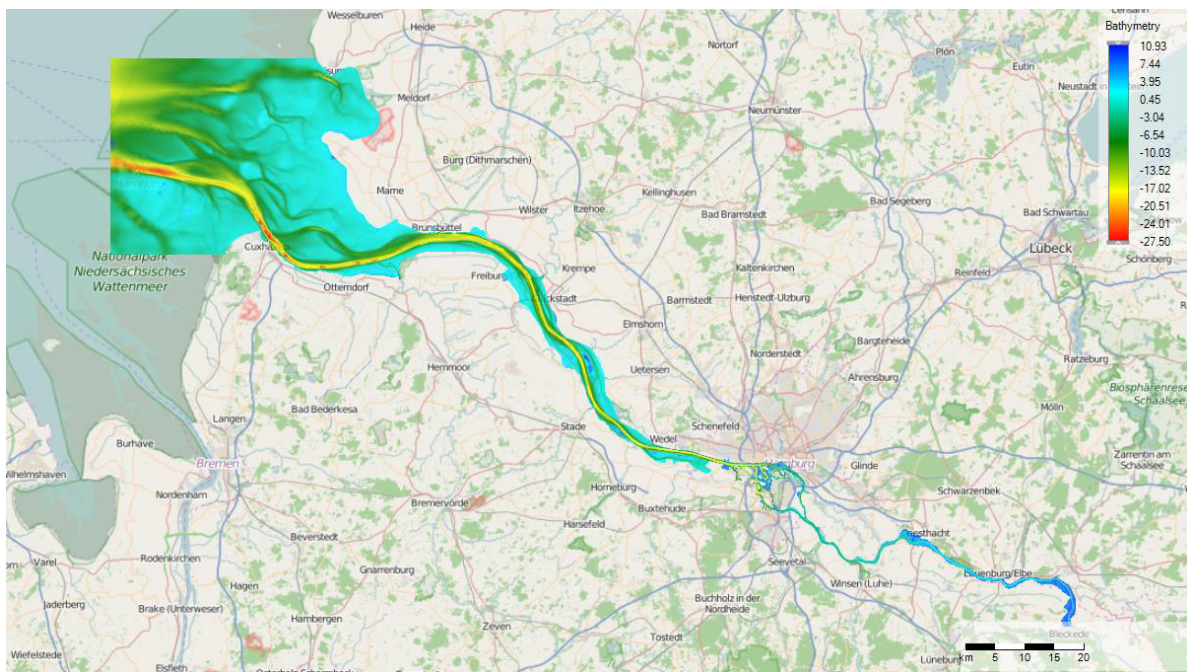


Bild 2: Topographie des Elbe Modells 2006 in der DeltaShell Benutzer-Oberfläche.

3 Das Elbe Modell mit der 2006 Bathymetrie

3.1 Zielsetzung

Ein D-Flow FM hydrodynamisches Modell des Elbe-Ästuars basierend auf der Bathymetrie 2006 wurde im Jahr 2015 unter *DeltaShell (Version 1.1.125.37607)* entwickelt. Das D-Flow FM-Netz wurde aus einem bestehenden hochaufgelösten unstrukturierten orthogonalen Gitter konvertiert, das in Kombination mit dem UnTRIM-Modell verwendet wurde (Casulli and Walters 2000). Dafür wurden die originalen kantenbasierten Tiefen zu den D-Flow FM-Netzknotten interpoliert. Die Entfernung zwischen benachbarten Polygonzentren reicht von 5 bis 930 Metern. Das Rechengitter besteht aus strömungsangepassten Vierecken entlang der Fahrrinne und Dreiecken im Wattgebiet, Übergangsbereichen und dort wo es nötig ist.

Das Modell erfasst bathymetrische Details mit hoher Rasterauflösung entlang des Fahrwassers und in komplexen Regionen wie Hafenanlagen, während in weiten und offenen Regionen wie Wattflächen eine viel gröbere Rasterauflösung angewendet wird.

Das Modell wurde zur Langzeitsimulation der Gezeitendynamik verwendet. Das Szenario mittlere Verhältnisse beschreibt 14 Tage im Sommer 2006 (05.07. - 20.07) und wurde ohne Windeinfluss simuliert. An der offenen Grenze wurden gemessene Wasserstände und ein konstanter Wert für den Salzgehalt verwendet. An der Zufluss-Grenze wurde ein gemessener Frischwasserabfluss angesetzt. Es wurden geeignete Anfangswerte für Wasserstand und Salzgehalt verwendet.

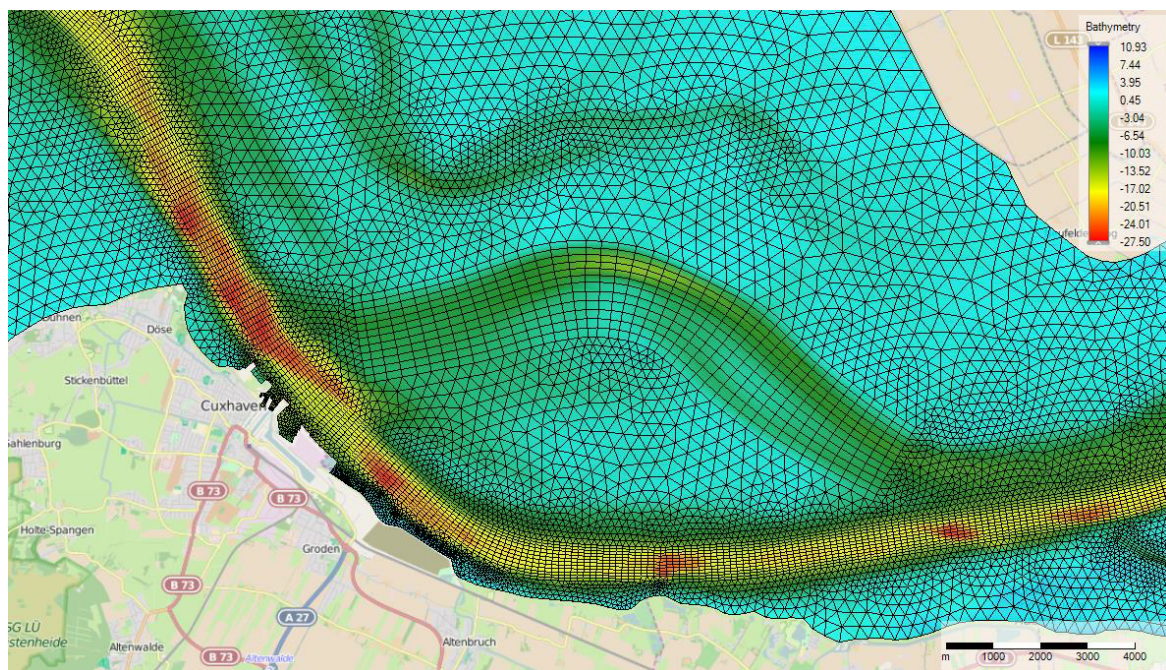


Bild 3: Topographie des Elbe Modells 2006 im Mündungsbereich in der „DeltaShell“ Benutzeroberfläche. Verwendung der strömungsangepassten Elemente in der Fahrrinne und Dreiecken in den offenen Wattgebieten.

Der Vergleich von Simulationsergebnissen mit Messungen zeigte eine vernünftige Übereinstimmung an verschiedenen Orten. Berechnungsergebnisse von D-Flow FM und UnTRIM für ein

tiefengemitteltes (2D) Szenario wurden ebenfalls verglichen. Beide Modelle verhalten sich ähnlich und liefern vergleichbare Ergebnisse.

Die vorliegende Studie zielte darauf ab herauszufinden, ob D-Flow FM eine Alternative zu DELFT3D ist. Daher sind Recheneffizienz, Stabilität, Robustheit und Benutzerfreundlichkeit wichtige Kriterien im Entscheidungsprozess.

3.2 Gitternetzherzeugung/-Konversion

D-Flow FM basiert auf einem unstrukturierten Gitter und verwendet ein *staggered* also versetztes Verfahren für die Diskretisierung der zweidimensionalen Flachwasser-Gleichungen ähnlich wie UnTRIM. Diese Implementierung setzt die Orthogonalität des Gitters voraus. Damit sind die Gitternetze in D-Flow FM und UnTRIM kompatibel. Die Konvertierung eines UnTRIM Gitters findet unter dem Gitter-Generator *RGFGRID* statt, der auch als Plugin unter *DeltaShell* verfügbare ist (Bild 4). *RGFGRID* bietet eine direkte Konvertierung der Geometrie vom Casullischen unstrukturierten UnTRIM -Gittern. Die Tiefen werden in einem zweiten Schritt darauf gemappt wobei die positive Richtung im Gegensatz zu UnTRIM nach oben gerichtet wird. Neben der Orthogonalität ist auch die Gleichmäßigkeit des Gitters (*smoothness*) eine weitere und wichtige Eigenschaft, die das Gitter aufweisen muss. *RGFGRID* bietet auch die Möglichkeit die Orthogonalität sowie die *smoothness* des Gitters zu optimieren ähnlich wie JANET. Ein weiterer und manchmal notwendiger Gitter-Optimierungsschritt ist das Zusammenfügen von ganz kleinen Polygonen, die das explizite numerische Advektionsverfahren von D-Flow FM verlangsamen.

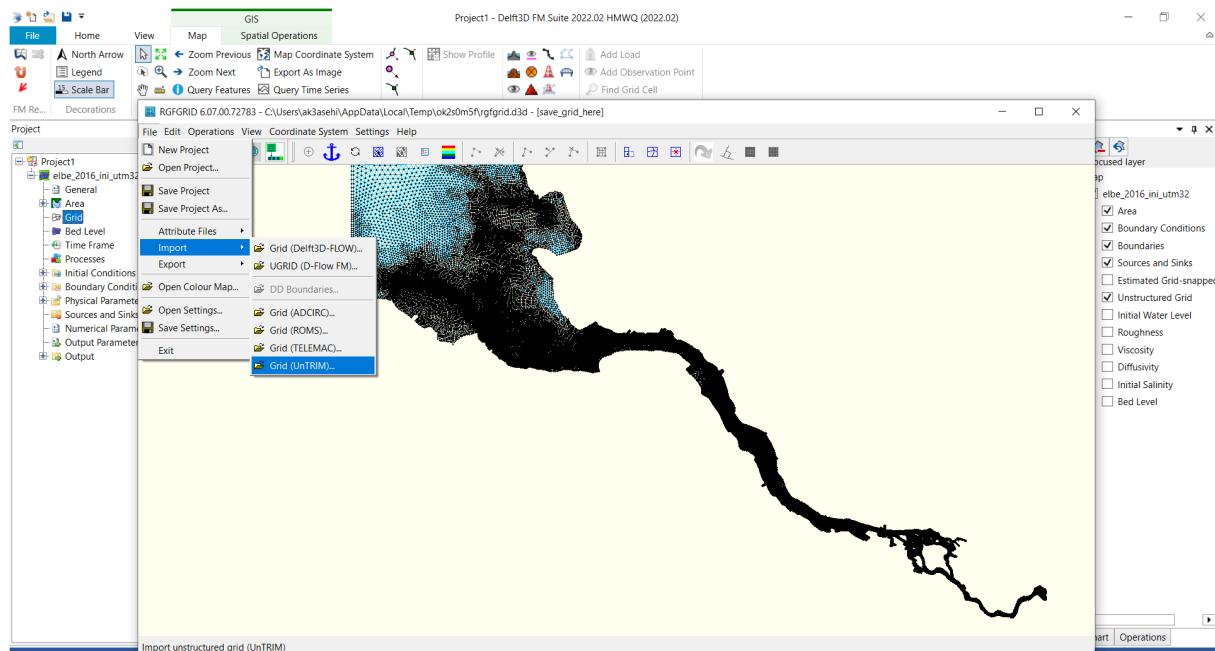


Bild 4: Konvertierung eines UnTRIM unstrukturierten Elbe-Gitter anhand der Funktionalität „Import UnTRIM“ von *RGFGRID*. Die Orthogonalität sowie die „smoothness“ des Gitters werden dabei beibehalten. Weitere Optimierung ggf. notwendig.

3.3 Modell Kalibrierung: numerische und physikalische Einstellungen

Die Simulation mit dem HN-Modell D-Flow FM erfordert, dass der Anfangszustand der Zustandsgrößen sowie deren zeitvariable Werte an den Modellrändern (seeseitiger und oberstromseitiger Rand) bekannt ist. Im vorliegenden Fall werden die Wasserstände und der Salzgehalt am seeseitigen Rand sowie der Zufluss mit einer Salzkonzentration am oberstromseitigen Rand vorgegeben. Diese Daten werden in der Regel durch Messungen erhoben.

Die Anfangsverteilung der Strömungen und des Salzgehalts zum Beginn des Untersuchungszeitraums ist im Allgemeinen nicht bekannt. Sie muss sich im Modell selber einschwingen.

In der vorliegenden Studie der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006 wurden die Geschwindigkeit mit 0 m/s, das Wasser in Ruhe, und eine Salzgehaltsverteilung, die dem mittleren beobachteten Zustand ähnelt eingesteuert. Das Modell stellt sich infolge der gesteuerten Tidewelle und des gesteuerten Oberwassers schnell ein.

Die Verteilung der Zustandsgrößen hängt außerdem ab von den Kalibrierungsparametern.

Für die aktuelle Studie wurden recht einfache Einstellungen verwendet. Das Modell wurde in 2D und mit 5 zeitvariablen Sigma-Schichten gerechnet. Die Bodenreibung wurde nach dem Manning-Gesetz gerechnet wobei der Manning-Koeffizient mit dem Wert 0.023 [s/m^{1/3}] konstant über das gesamte Gebiet gehalten wurde.

Tabelle 4: Relevante numerische, physikalische und gitterbezogene Einstellungen in der MDU Steuerdatei (Master Definition Unit).

Parameter	Value
Time step	CFL (0.7)
Vertical layers	5 uniform sigma layers
Manning coefficient	0.023 [s/m ^{1/3}]
Uniform hor. eddy viscosity	0.001 [m ² /s]
Uniform hor. eddy diffusivity	0.001 [m ² /s]
Conveyance2D	-1 (bed level at velocity point is mean value of corners)
Bed level type	3 (piecewise cst., lowest face center, mean corner bed level)
Vertical eddy viscosity	K-eps
Advection scheme for momentum	3 Perot q(uio-u)
Limiter type for momentum	4 (Monotone central)
Limiter type for salt	4 (Monotone central)
Vertical adv. Type for salt	5 (space: central / time: implicit θ) transportmethod = 1
Implicitness factor	0.6
Solver type	4 (SodekGS-Saadilud) / 7 (Parallel/GS)

Ein konstanter Wert für die horizontale Viskosität/Diffusivität wurde verwendet ($0.001 \text{ [m}^2/\text{s]}$). Im 3D Fall wurde das K-Epsilon Turbulenz-Modell für die Berechnung der vertikalen Viskosität/Diffusivität verwendet. Tabelle 4 führt die wichtigsten numerischen und physikalischen Parameter zusammen.

Anhand der DeltaShell-UI wurde das Elbe-Modell mit den geschilderten numerischen und physikalischen Parametern aufgestellt und gestartet. Folgende Simulationen wurden durchgeführt:

1. 3D Rechnung der mittleren Verhältnisse 07.2006
2. 2D Rechnung der mittleren Verhältnisse 07.2006 - Vergleich mit UnTRIM Ergebnisse

3.4 Ergebnisse für mittlere Verhältnisse Juli 2006

Die charakteristischen Eigenschaften der Systemparameter des Elbe Ästuars werden mit dem HN-Modell beschrieben. Der Vergleich gemessener und berechneter Wasserstände, Strömungsgeschwindigkeiten ist die Benchmark, die die Naturähnlichkeit und Prognosefähigkeit des HN-Modells beweist.

Es gilt hier zu berücksichtigen, dass das eingesetzte HN Modell die Zustandsgrößen an diskreten Positionen liefert, die repräsentativ sind für größere Polygonflächen (Wasserstand), Kantenlängen (Strömung) oder Zellenvolumen (Salzgehalt).

Im Falle von 3D Berechnungen werden die relevanten Zustandsgrößen an diskreten Schichten auch in der Vertikalen berechnet und ausgegeben, so dass eine gewisse Glättung der Ergebnisse stattfindet. Dadurch ist das HN-Modell nicht in der Lage die turbulenten Schwankungen der Strömungen aufzulösen, die durch Messungen aber erfasst werden können. Dieser Sachverhalt gilt ebenso für den Vergleich von gemessenen und berechneten Konzentrationen.

Im Folgenden werden die Wasserstandsverläufe der mittleren Verhältnisse im Juli 2006 vorgestellt. Das Modell schwingt sich sehr schnell vom initialen Zustand ein. Nach gerade einer Tide erreicht das Modell den Quasi-Gleichgewichtszustand. Es wurde darauf geachtet, dass die eingesteuerten Randwerten tatsächlich vom Modell reproduziert werden. Abweichungen zwischen Modell und Messung werden durch das Modellgebiet transportiert und durch die nicht linearen Effekte wie Bodenreibung und Turbulenz, weiter potenziert. In Bild 5 kann gezeigt werden, dass das Modell die eingesteuerten Randwerte am Pegel *Bake A* ohne Diskrepanz reproduziert hat.

Im weiteren Verlauf stromauf im Ästuar reproduziert das Modell die Messung sehr gut wie man auf dem Bild 6 am Pegel Cuxhaven KM725 sehen kann. Lediglich, wird das Niedrigwasser leicht unterschätzt. Hier muss man drauf hinweisen, dass ein konstanter Wert für den Mannings-Koeffizient für das gesamte Gebiet verwendet wurde. Die Bodenreibung ist damit nicht realistisch abgebildet. Auch die Lineare Regression Zwischen Messungen und Modell-Ergebnisse zeigt die sehr gute Übereinstimmung wie Bild 7 es zeigt.

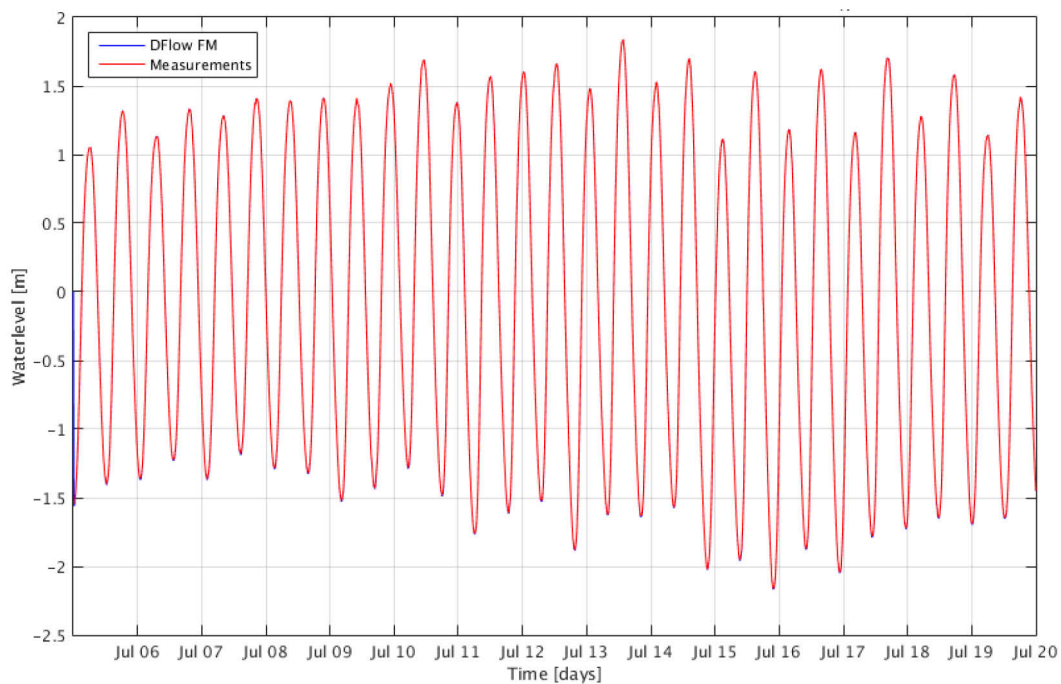


Bild 5: Verifizierung des eingesteuerten Wassertandes am Pegel Bake A. Vergleich Modell Messungen.

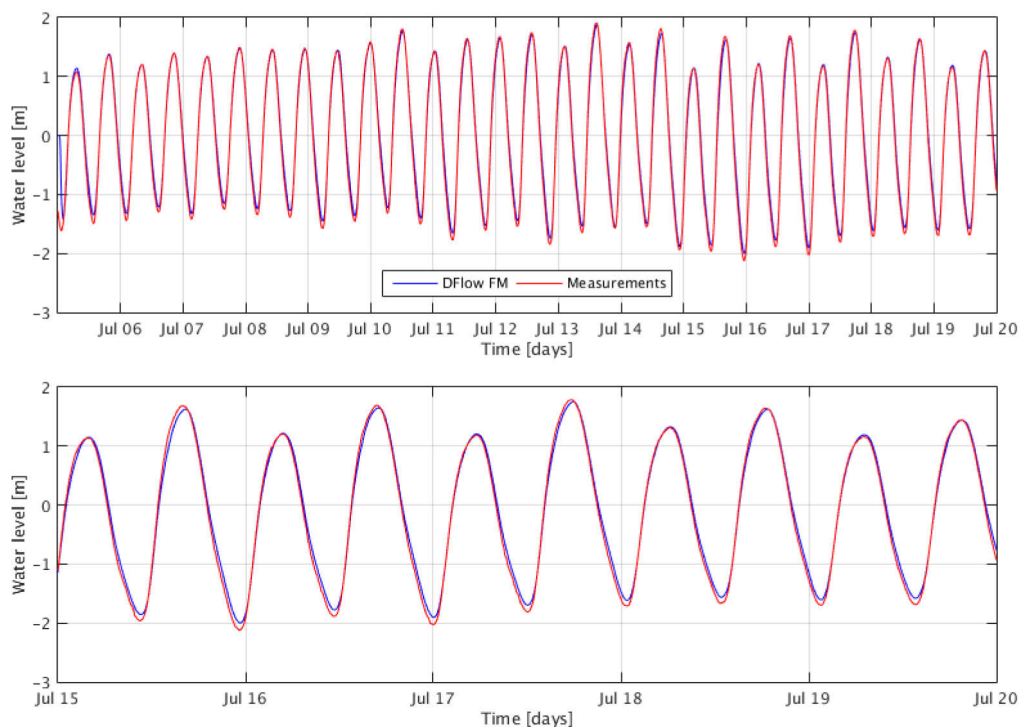


Bild 6: Wasserstand am Pegel Cuxhaven (KM 725) für einen Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006 (oben) und für die letzten 10 Tiden (unten). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.

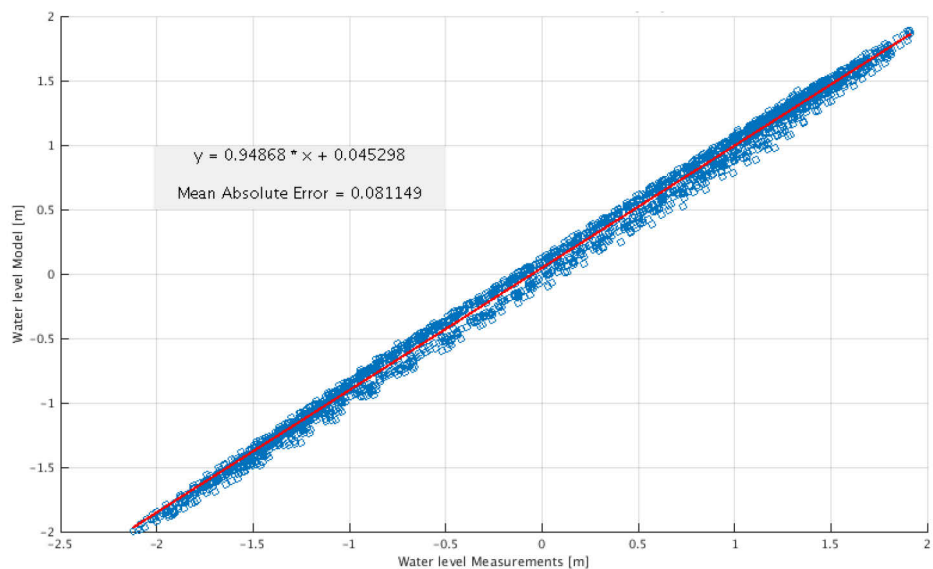


Bild 7: Scatter-Plot am Pegel Cuxhaven (KM 725). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.

Weiter stromauf zeigt Bild 8 den Vergleich im Hamburger Hafen am Pegel St-Pauli. Hier hat man wieder eine sehr gute Übereinstimmung. Das Modell tendiert dazu, leicht höhere Hochwasserstände zu berechnen.

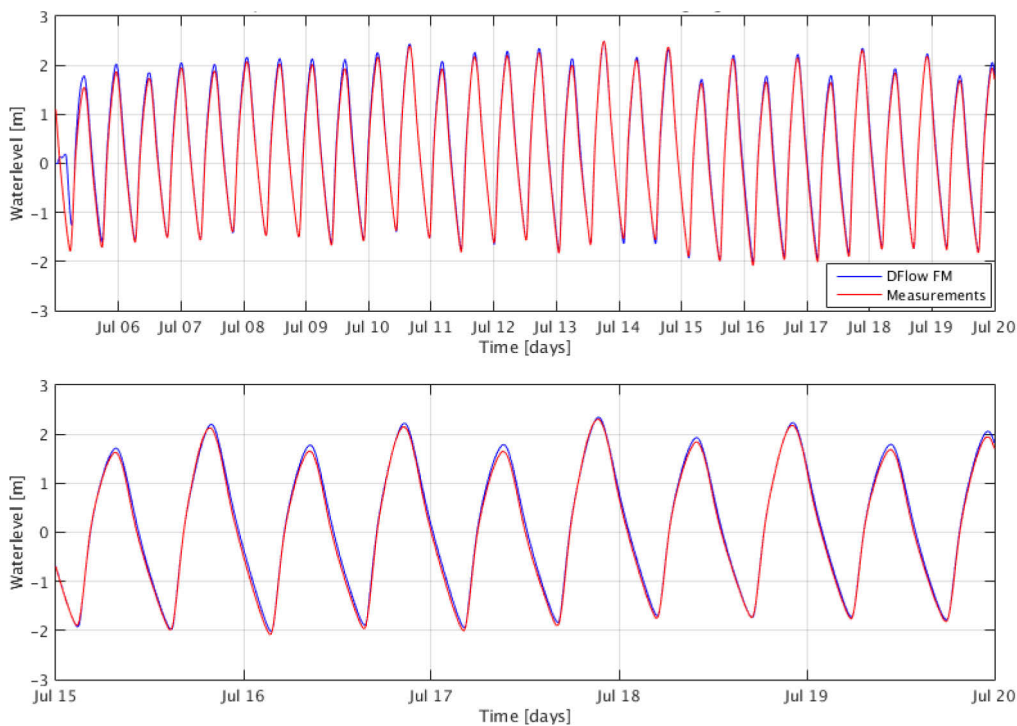


Bild 8: Wasserstand am Pegel St. Pauli (KM 623) für ein Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006 (oben) und für die letzten 10 Tiden (unten). Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen.

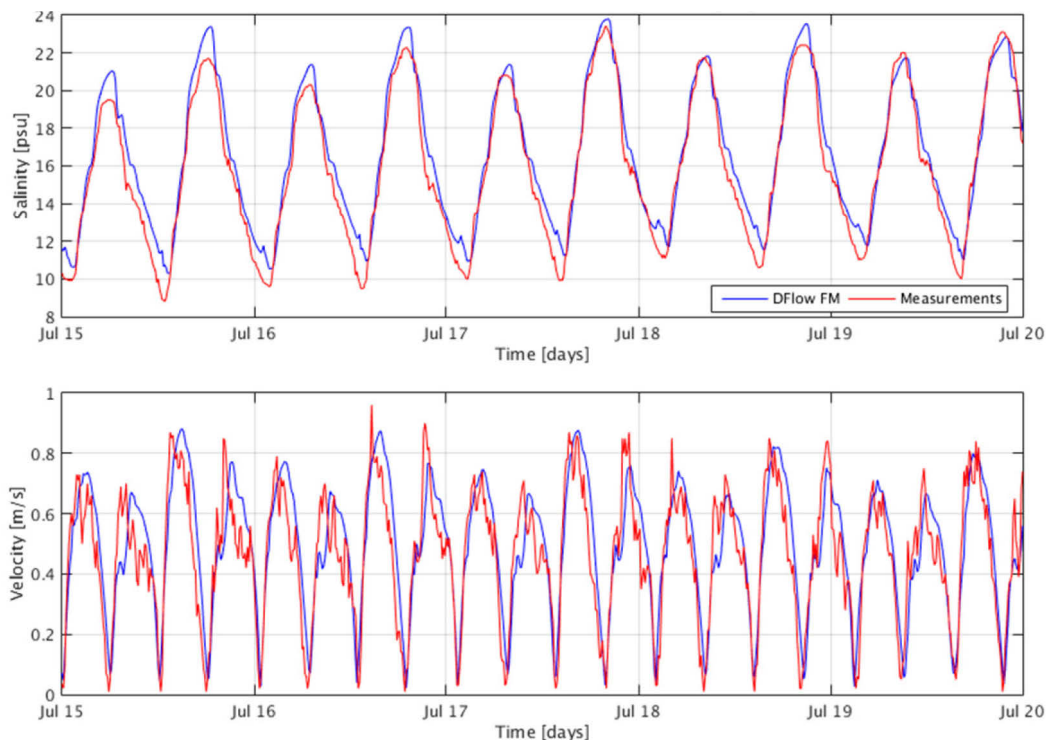


Bild 9: Salzgehalt (oben) und Strömungsgeschwindigkeit (unten) an der untersten Schicht am Pegel LZ3 Altenbrucher Bogen (KM 718). Vergleich mit Messungen (2.5 über Sohle) für die letzten 10 Tiden. Gute Übereinstimmung mit Messungen.

Ein weiteres Untersuchungsziel mit dem D-Flow FM Elbmodell war die Prüfung der Ergebnisse am Pegel LZ3 (Altenbrucher Bogen, KM 718). Dort haben frühere Simulationen mit dem UnTRIM Modell (https://ewisa.baw.de/files/06967_KW_A39550310062-11.pdf) eine systematische Unterschätzung der Ebbestromgeschwindigkeit geliefert. Die Güte der gemessenen Werte wurde dadurch in Frage gestellt. Das D-Flow FM Modell sollte Klarheit darüber verschaffen.

Der Vergleich der Modell Ergebnisse am Pegel LZ3 an der untersten Schicht mit den Messungen, die etwa 2.5 m über den Boden erhoben wurden, zeigt eine sehr gute Übereinstimmung für die Strömungsgeschwindigkeit und eine befriedigende Übereinstimmung des Salzgehalts (Bild 9).

Damit steht die Güte der gemessenen Werte nicht mehr in Frage.

3.5 Vergleich mit UnTRIM

Der Multimodell-Ansatz für die Bearbeitung der vielfältigen und anspruchsvollen Fragestellungen in der BAW war einer der Hauptmotivationen für die Einführung und Integration der neuen *Delft3D FM Suite*. D-Flow FM als Rechenkern für die Hydrodynamik und Transport-Vorgänge ist das Pendant zu UnTRIM. Numerisch betrachtet sind beide Modelle sehr ähnlich vor allem durch die Verwendung des Semi-expliziten Verfahren (Casulli et. Walters 2000). Lediglich wird die Advektion in D-Flow FM durch ein explizites Verfahren mit CFL Limitierung anders gehandhabt.

Eine vergleichbare und faire Abbildung der 3D baroklinen Effekte zwischen den zwei Systemen war zum Zeitpunkt der Studie unmöglich, da D-Flow FM immer noch in der Entwicklung stand. Daher wurde ein Vergleich mit tiefengemittelten Simulationen ohne barokline Effekte

vorgenommen und durchgeführt. Dieses einfache Szenario sollte eine klare Aussage hinsichtlich der räumlichen und numerischen Diskretisierung der beiden Systeme liefern. Dafür wurden 3 Tage der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006 mit denselben Einstellungen und Randwerten gerechnet und ausgewertet.

Die Ergebnisse des Wasserstandes und Strömungsgeschwindigkeit am Pegel Cuxhaven werden auf Bild 10 gezeigt. Die Übereinstimmung ist auch kurz nach dem Kaltstart sehr gut. Die Beträge der Flut- und Ebbeströmungen sind auch sehr vergleichbar. Weiter stromauf am Pegel LZ3 sind die Wasserstände sehr vergleichbar. Die beiden Modelle unterscheiden sich lediglich in dem Betrag der Flutstromgeschwindigkeit wobei D-Flow FM höhere Werte liefert (+ ~12 cm/s) wie Bild 10 es zeigt. Im Hamburger Hafen am Pegel St Pauli liefern beide Modelle sehr ähnliche Ergebnisse sowohl für den Wasserstand als auch für die Strömungsgeschwindigkeit (Bild 11).

Diese grundlegenden Studien lassen folgendes schlussfolgern:

- D-Flow FM ist numerisch stabil und robust
- D-Flow FM ist massen- und impulserhaltend
- D-Flow FM ermöglicht auch Trockenfall und Überflutung
- D-Flow FM ist akkurat (gute Übereinstimmung mit Messungen)
- D-Flow FM liefert vergleichbare Ergebnisse mit UnTRIM im 2D Fall

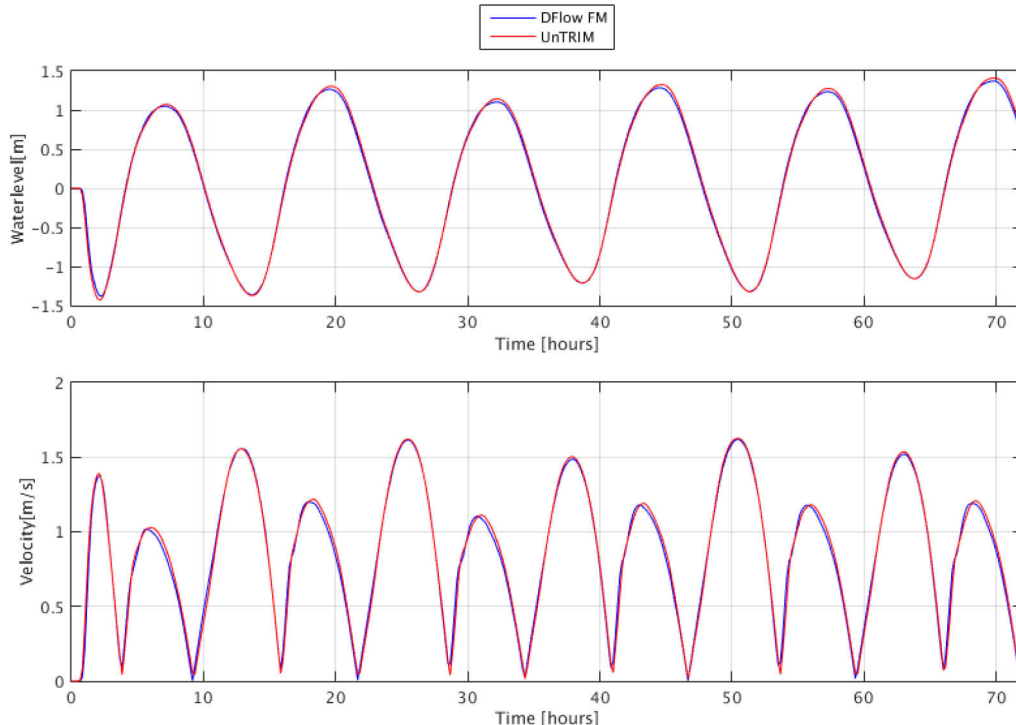


Bild 10: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel Cuxhaven (KM 725) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.

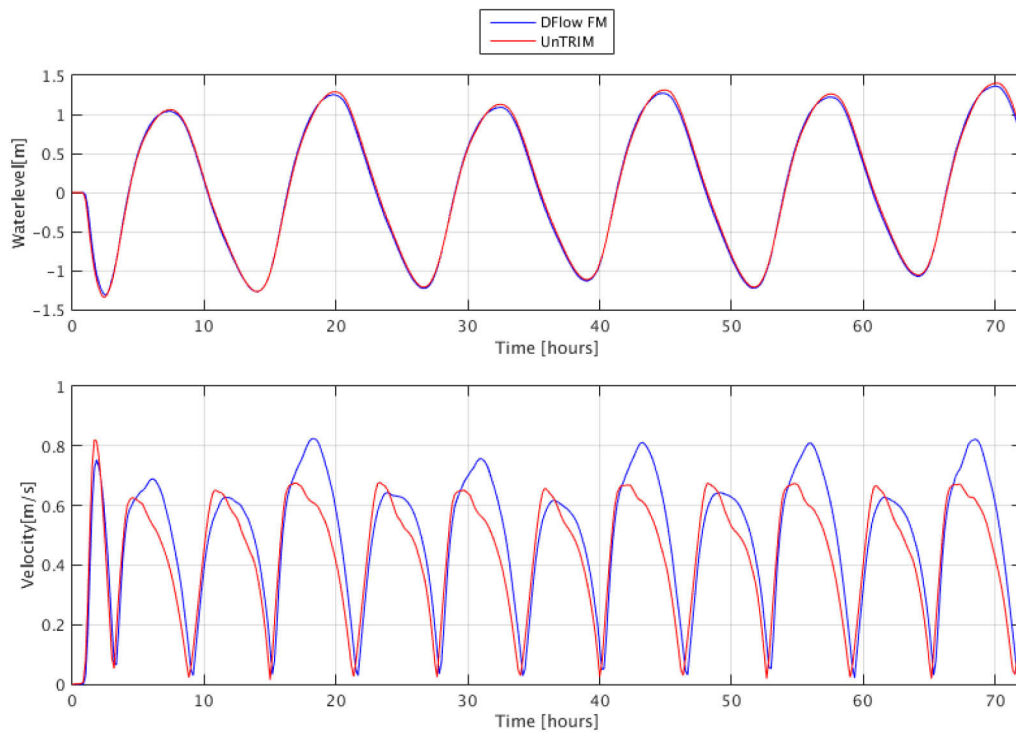


Bild 11: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel LZ3 (KM 718) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.

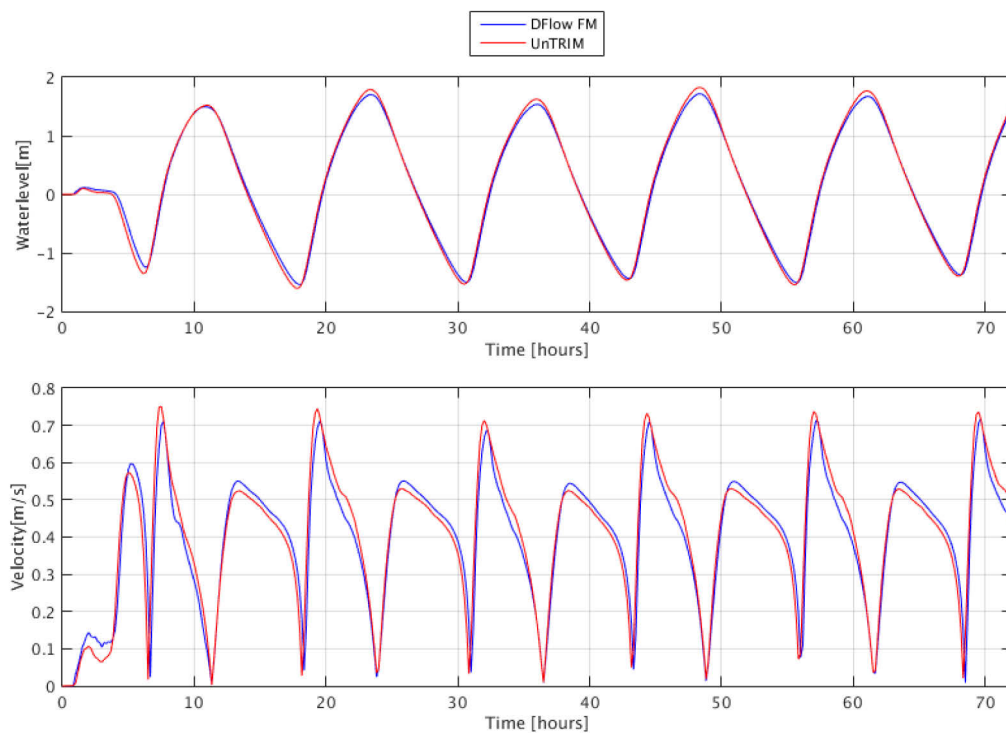


Bild 12: Vergleich der Wasserstände und Strömungen zwischen D-Flow FM (2D) und Un-TRIM (2D) am Pegel St Pauli (KM 623) für die letzten 3 Tiden der mittleren Verhältnisse im Juli 2006.

4 Das Elbe Modell mit der 2016 Bathymetrie (Singularity Version)

4.1 Zielsetzung

Da D-Flow FM kontinuierlich weiterentwickelt wird, werden auch laufend neue Versionen freigegeben. Dies bedeutet, dass eine fortwährende Installation des Systems (Linux und Windows-*DeltaShell*) und Überprüfung der erzielten Ergebnisse durchgeführt werden müssen. Daher wurde für das Elbe-Ästuar ein zweites und aktuelleres Modell mit neuem Gitter und der Bathymetrie vom Jahr 2016 aufgestellt. Die Berechnungen erfolgten mit einer Linux Build Version (erstes Szenario) sowie anhand der neuen Singularity Image Version auf Kronos (zweites Szenario). Drei Themen wurden im Verlauf der Integration in den Fokus genommen:

- Einfluss der vertikalen Diskretisierung auf die Bodenreibung,
- Quantifizierung des Einflusses einer Fahrrinnenvertiefung und
- Testen der Anpassungen und Vereinheitlichung der NetCDF D-Flow FM Ergebnisse.

Zwei Szenarien wurden dafür gerechnet:

1. Einfache Randsteuerung mit einer M2 Partialtide
2. Mittlere Verhältnisse im Sommer 2006

Für die Studien über den Einfluss der vertikalen Diskretisierung auf die Bodenreibung sowie zur Quantifizierung des Einflusses einer Fahrrinnenvertiefung wurde das erste Szenario mit den idealisierten Randbedingung (M2 Partialtide) gerechnet. Ein Vergleich mit UnTRIM wurde auch durchgeführt.

Die Anpassungen in den NetCDF D-Flow FM Ergebnissen wurden nur anhand des zweiten realistischen Szenarios getestet und ausgewertet. Dazu wurde dieses Szenario für das Benchmarking (siehe Kapitel 5) verwendet.

4.2 Das Modell

Ein klassisches unstrukturiertes Elbe-Gitter mit 127212 Polygonen wurde anhand von RGFGRID nach D-Flow FM konvertiert. Die entsprechende Bathymetrie vom Jahr 2016 wurde ohne Interpolation darauf gemappt mit Tiefen an den Kanten (*BedlevTyp = 2*) wie es auf Bild 13 und Bild 14 zu sehen ist. Dazu wurde eine Ausbauvariante mit Fahrrinnenvertiefung und ohne UWAs (Unterwasserablagerungsfläche) aufgestellt (siehe Bild 15). Ziel war es die Prognosefähigkeit von D-Flow FM zu erkunden und mit den Ergebnissen von UnTRIM zu vergleichen.

Das Modell wurde in 2D und 3D mit verschiedenen vertikalen Auflösungen gerechnet. Die Bodenreibung entsprach das Mannings-Gesetz. Der Mannings-Rauheits-Koeffizient n wurde für die Kalibrierung des Modells verwendet.

Die Viskosität/Diffusivität wurde in der Horizontale konstant gehalten (0.01 m²/s) und in der Vertikale mit dem K-Epsilon Modell gerechnet.

Eine neuere D-Flow FM Version aus dem Jahr 2020 (1.2.38.63285) basierend auf dem Linux Build sowie eine *Singularity Container* Version wurden für die verschiedenen Fragestellungen der Studie verwendet.

4.2.1 Szenario mit M2 Partialtide am offenen Rand

In dieser grundlegenden Studie wurde eine M2 Partialtide am offenen Rand mit einer 149 cm Amplitude (Hälfte des gemessenen mittleren Tidenhubs in Schahoern (DGJ*, 2014)) eingesteuert. Das Oberwasser in Geesthacht von 712 m³/s entspricht den Mittelwert der Jahresreihe 1926-2014 (DGJ 2014). Der Simulationszeitraum erfasste einen kompletten Monat (hier exemplarisch Januar 2016). Diese Simulationszeit wurde in UnTRIM für statistische Zwecke festgelegt und hier übernommen obwohl das Modell sich schnell aus dem Kaltstart einstellt. Als Kalibrierungsziel wurde der mittlere Tidenhub am Hamburger Hafen (St. Pauli) von 372 cm gesetzt. Das entspricht dem gemessenen Mittelwert im Zeitraum 2010-2014 (DGJ*, 2014).

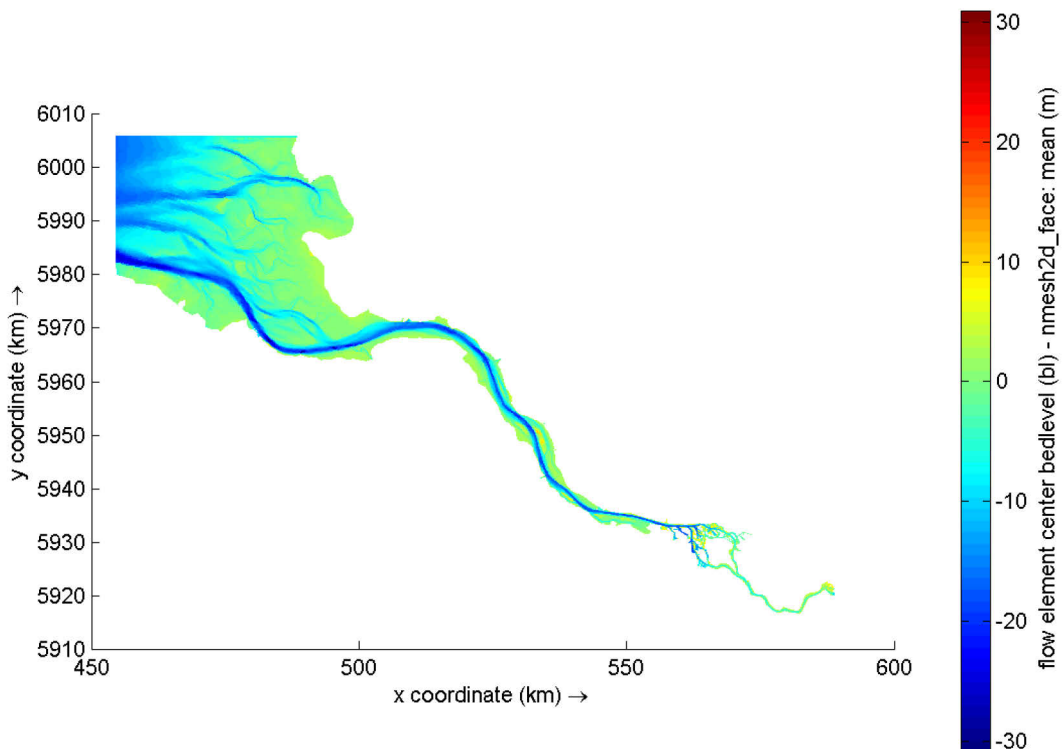


Bild 13: Bathymetrie des Elbe-Modells aus dem Jahr 2016 im Ist-Zustand. Visualisierung mit dem Quickplot-Tool der Delft3D FM Suite.

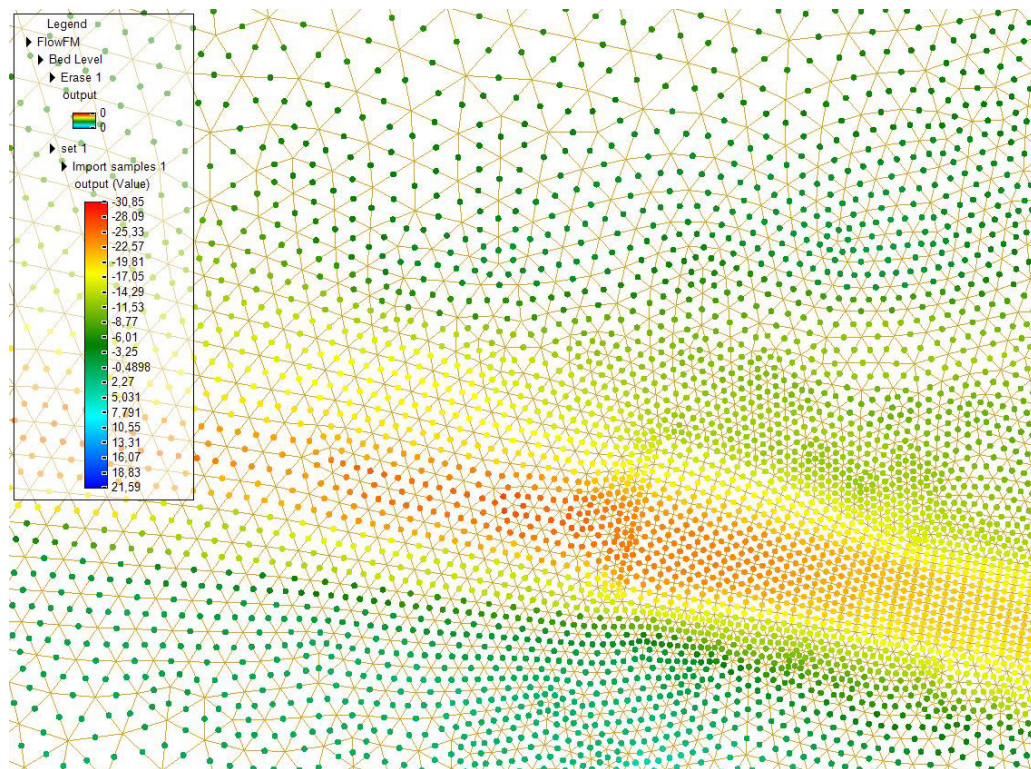


Bild 14: *Nahaufnahme der Bathymetrie an der Elbmündung. Die Tiefen wurden an den Kanten aus dem UnTRIM-Gitter original übernommen. Visualisierung unter DeltaShell.*

Ergebnisse

Der Referenz 3D D-Flow FM Modell mit 10 Sigma-Schichten für den Ist-Zustand wurde anhand des Rauheits-Koeffizienten nach Manning kalibriert. Der Wert $n = 0.0247 \frac{s}{m^{1/3}}$ lieferte einen Tidenhub von 371 cm am Pegel St. Pauli im Hamburger Hafen und wurde für den Rest der Studie übernommen. Dieselbe 3D Simulation im Ausbauzustand liefert eine Erhöhung des mittleren Tidenhubs am Pegel St. Pauli um 7,4 cm und entspricht damit der Erwartung aus UnTRIM wie aus dem Bild 16 zu entnehmen ist.

Ohne barokline Effekte durch Salz oder Temperatur und für Effizienz Zwecke, ist es sinnvoller die Simulation in 2D durchzuführen. Die Ergebnisse sollten sich mit dem 3D Fall decken. Der 2D Lauf zeigt aber deutliche Unterschiede zu dem 3D Lauf mit 10 Sigma-Schichten vor allem stromauf von Hamburg dort wo die Modell-Tiefe an der Fahrinne mit etwa 5 m deutlich geringer ist als die Modell-Tiefe stromab von Hamburg die etwa 20 m beträgt (siehe Bild 17). Der Unterschied im mittleren Tidenhub (Mthb) erreicht bis zu 20 cm am Pegel Zollenspieker und auch stromauf davon bis zum Wehr Geesthacht.

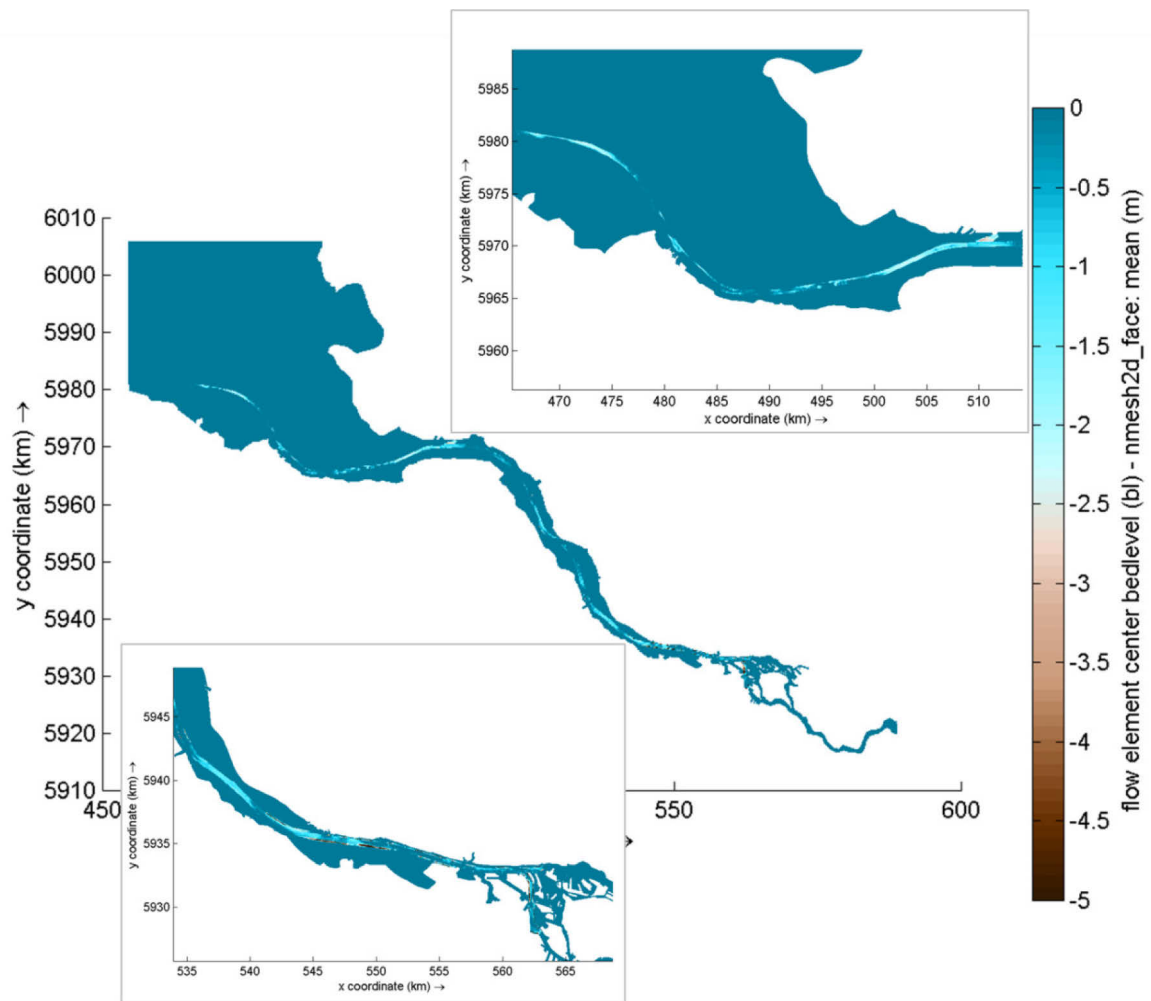


Bild 15: *Elbe-Bathymetrie 2016: Tiefen-Differenzen zwischen dem Ausbau-Zustand (ohne UWA) und dem Ist-Zustand. Gesamtgebiet und Nahaufnahmen an der Mündung und an der Begegnungsbox.*

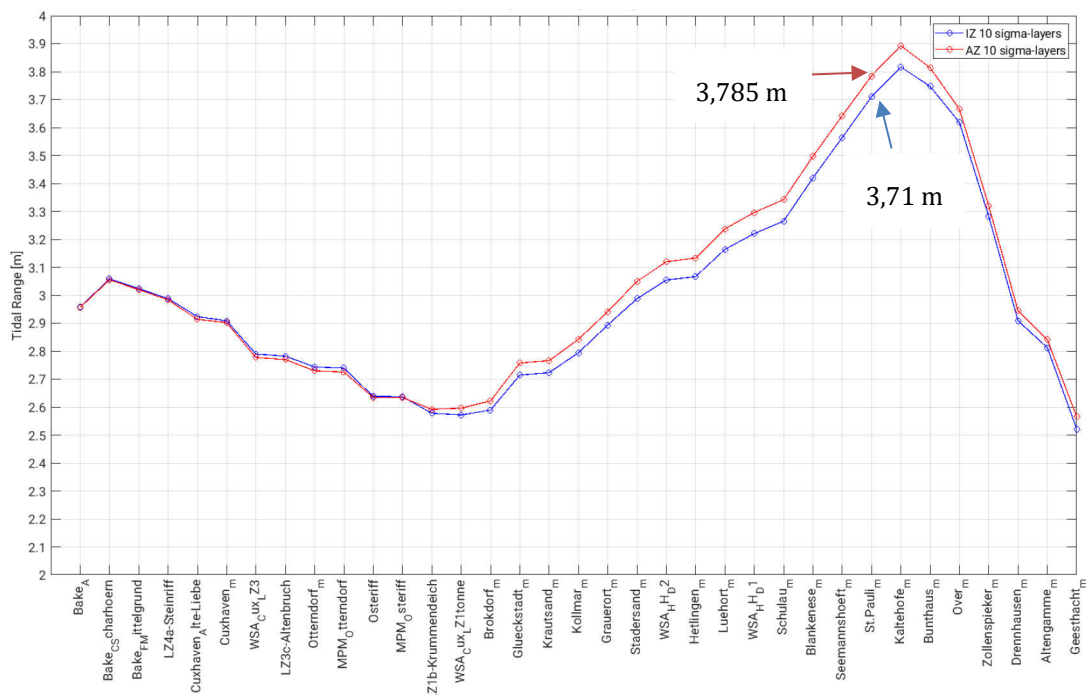


Bild 16: Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe nach einem Monat Simulation für den Ist-Zustand (blau) und Ausbauzustand (Rot) mit dem 3D Modell. Die Kalibrierungsmarke 371 cm am Pegel St. Pauli wurde hier im Ist-Zustand erzielt.

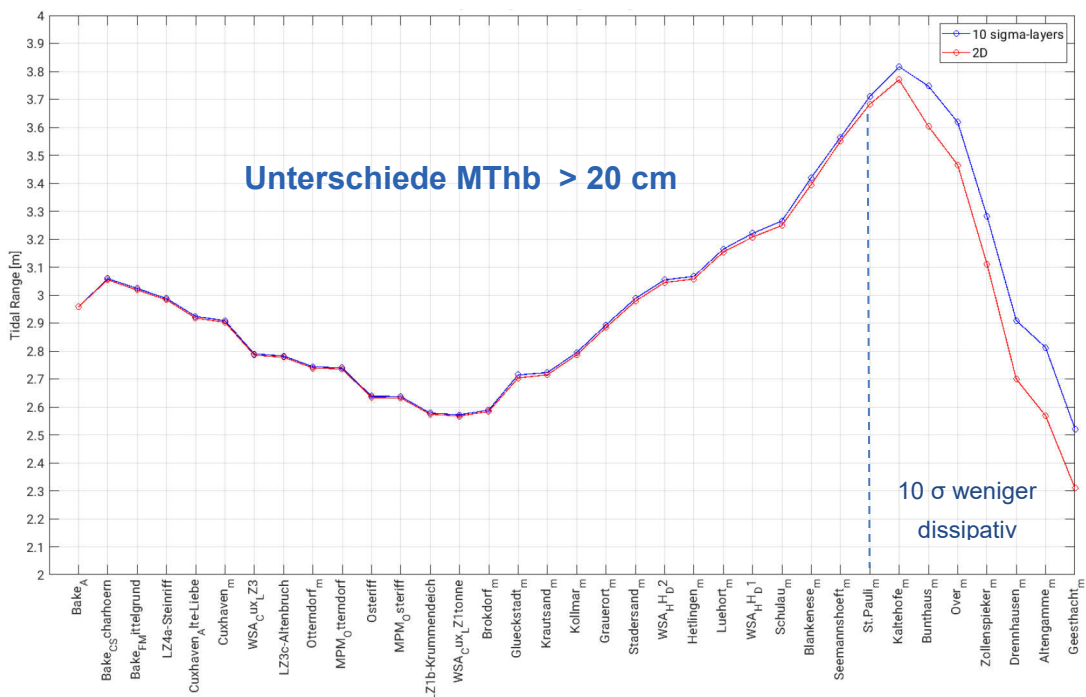


Bild 17: Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe für den Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen 2D und 3D Ergebnisse. Für das 3D Modell wurden 10 Sigma-Schichten verwendet. Unterschiede bis zu 20 cm stromab von Hamburg.

Der maßgebliche Faktor für die Energiedissipation ist die Bodenreibung. Die Bodenschubspannung in Anhänglichkeit von der Strömungsgeschwindigkeit und dem Reibungsbeiwert ist:

$$\tau_b = \rho \cdot C_f \cdot U^2$$

Der Reibungsbeiwert laut Mannings-Gesetz wird wie folgt gegeben:

$$C_f = \frac{g}{\sqrt[3]{h/n^2}}$$

ρ steht für die Dichte des Wassers, g für die Erdbeschleunigung und n für den Mannings-Koeffizient. Im 2D Fall ist h die gesamte Wassertiefe und U die mittlere Geschwindigkeit, die an der Position $0.37H$ liegt.

Im 3D Fall ist h die Höhe der untersten Modell-Schicht dz und U die mittlere Geschwindigkeit an dieser Schicht an der Position $0.37dz$.

Die Energie Dissipation im 3D Fall hängt also von der Höhe der untersten Modell Schicht ab. Die Sigma-Diskretisierung führt dazu, dass die Gelände-Folge Schichten im flachen Gewässer sehr dünn sein können. Die dort herrschende Strömungsgeschwindigkeit, die zum Quadrat in das Gesetz geht, fällt laut dem logarithmischen Profil immer kleiner aus. Die entsprechenden Rauheits-Koeffizienten werden zwar größer, reichen aber nicht für den Ausgleich. Das führt zu weniger Energiedissipation durch Reibung im Vergleich zum 2D Fall.

Bild 18 erläutert die Zusammenhänge zwischen Bodenreibung, Tiefe und Strömungsgeschwindigkeit mit dem Mannings-Gesetz.

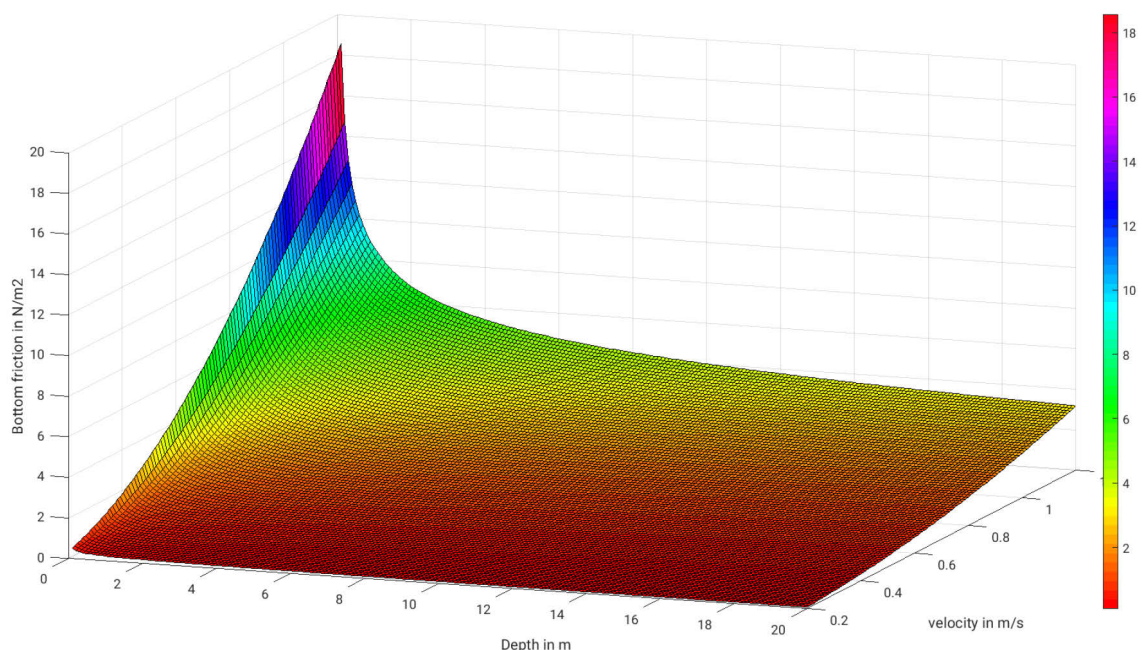


Bild 18: Die Boden-Schubspannung in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit und der Wassertiefe laut dem Mannings-Gesetz. Es gilt hier eine Energie-Dissipation im 3D Fall (Höhe der untersten Modell-Schicht) zu finden, die dem 2D Fall entspricht.

Verschiedene Tests mit der vertikalen Diskretisierung haben gezeigt, dass die 10 Z-Schichten Variante einen ähnlichen mittleren Tidenhub liefert wie der 2D Fall (siehe Bild 19). Hier werden die flachen Gebiete stromauf von Hamburg mit deutlich weniger Schichten abgebildet und damit werden auch höhere Strömungsgeschwindigkeit an der untersten Schicht gerechnet. Das führt wiederum zur ähnlichen Bodenreibung und Energie-Dissipation. Der aufgetretene Fehler durch den Einsatz von Sigma-Schichten im flachen Gebiet wird durch den direkten Vergleich mit dem Z-Schichten-Ansatz deutlicher.

Es gilt hier als Fazit eine vertikale Auflösung in 3D zu finden, die dieselbe Energiedissipation durch Bodenreibung liefert wie im 2D Fall. Dann sind beide Modelle von der Hydrodynamik her ohne baroklinen Term äquivalent. Auch für eine ortsvariable Bodenreibung ist der Vergleich für das Systemverständnis notwendig. Eine Verfeinerung der vertikalen Auflösung mit Z-Schichten für die baroklinen Terme (Salz, Temperatur und Sediment) soll unter Berücksichtigung der Energiedissipation durchgeführt werden (e.g. nur in tieferen Gewässern).

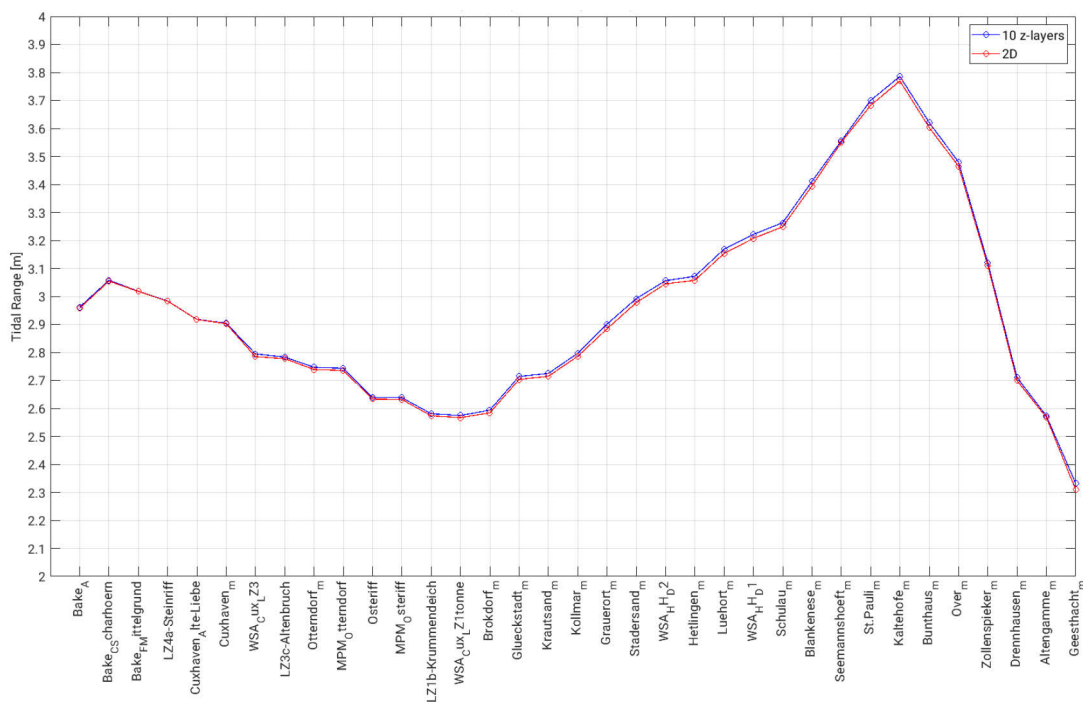


Bild 19: Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe für den Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen 2D und 3D Ergebnisse. Für das 3D Modell wurden 10 Z-Schichten verwendet. die Energie-Dissipation stromauf von Hamburg ist vergleich-bar.

Vergleich mit UnTRIM im 2D Fall:

Mit dem D-Flow FM Elbe Modell der Elbe wurde auch ein direkter Vergleich mit UnTRIM im 2D Fall unternommen. Dieselben Einstellungen wurden für beide Systeme verwendet. Der Mannings-Rauheits-Koeffizient wurde hier für beide Systeme auf dem Wert $n = 0.0245 \frac{s}{m^{1/3}}$ eingestellt damit das Kalibrierungsziel in St. Pauli wieder im 2D Fall erreicht von dem D-Flow FM Modell wird. Es sollte herausgefunden, ob die früheren guten Übereinstimmungen mit der Bathymetrie 2006 zwischen der älteren D-Flow FM Version und UnTRIM auch hier wieder erzielt werden können.

Bild 20 zeigt einen Vergleich des simulierten mittleren Tidenhubs entlang der Fahrrinne im Ist-Zustand zwischen D-Flow FM und UnTRIM. Die Ergebnisse sehen recht ähnlich aus. Die Diskrepanz bleibt sehr moderat. UnTRIM liefert einen etwas höheren Tidenhub (bis zu 5cm) im tieferen Teil des Ästuars stromab von Hamburg und einen etwas niedrigeren Tidenhub (bis zu 5 cm) im flacheren Teil des Ästuars stromauf von Hamburg. Am Pegel *Kaltehof* sind die Ergebnisse identisch. Im Ausbauzustand ist auch ein ähnliches Muster zu sehen wie Bild 21 es zeigt.

Die Fahrrinnenvertiefung führt zu folgenden Änderungen:

- Leichtes Absenken des Tidenhubs (bis zu 3 cm) vom offenen Rand hin bis zum Pegel Osterriff und
- Anheben des Tidenhubs (Max im Hamburger Hafen > 7 cm) ab Pegel Osterriff bis hin zum Wehr Geesthacht.

Beide Modelle verhalten sich ähnlich und zeigen die vorher geschilderten Änderungen. Diese Beobachtungen bestätigen die Schlussfolgerungen aus der vorherigen Studie (Kapitel 3) im Hinblick auf die Genauigkeit und Robustheit von D-Flow FM.

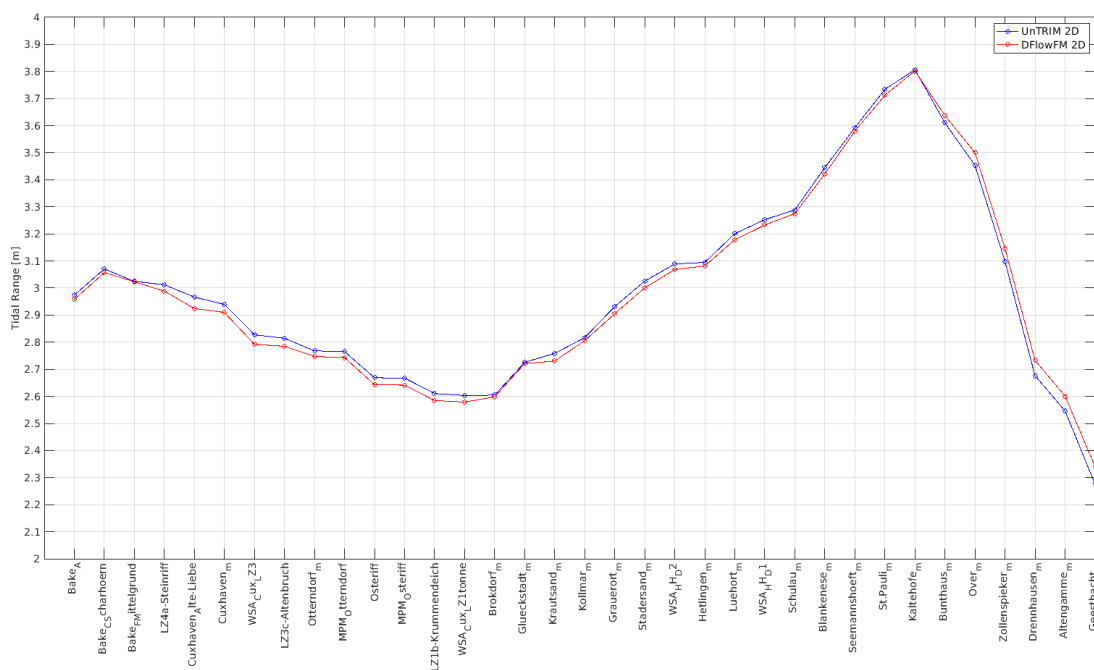


Bild 20: Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe im Ist-Zustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen D-Flow FM und UnTRIM Ergebnisse im 2D Fall.

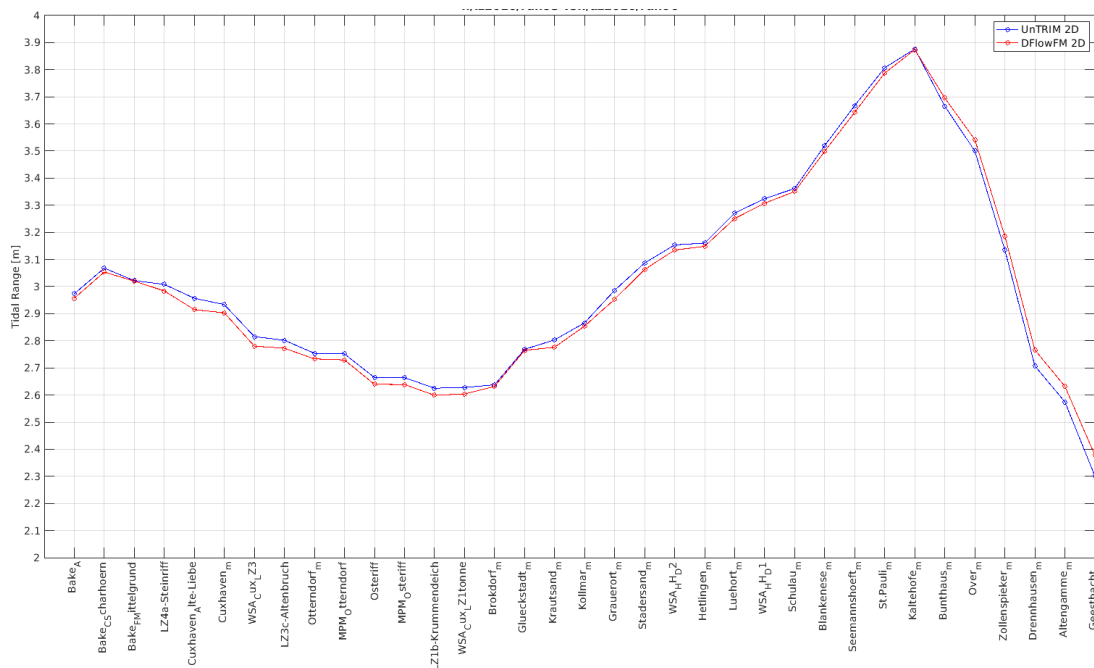


Bild 21: Mittlerer Tidenhub entlang der Elbe im Ausbauzustand nach einem Monat Simulation. Vergleich zwischen D-Flow FM und UnTRIM Ergebnisse im 2D Fall.

4.2.2 Szenario mit den mittleren Verhältnisse im Sommer 2006

Diese Studie hat zwei Ziele: die Erzielung ebenso guter Ergebnisse wie aus der ersten Studie (Kapitel 3) mit realistischen Randbedingung anhand einer neueren D-Flow FM Version (basierend auf die *Singularity Container* Technologie) einerseits und andererseits die Analyse der Anpassungen und Vereinheitlichung der UGRID CF NetCDF Ergebnisse aus D-Flow FM ohne Änderungen anhand der BAW-Postprozessoren.

Aus den Erfahrungen der vorherigen Studie mit einer einfachen Randbedingung (M2 Partialtide) wurde für das Modell eine vertikale Diskretisierung mit 10 Z-Schichten verwendet. Die restlichen Einstellungen blieben unverändert.

Die Wasserstand-Ergebnisse aus dem Modell stehen in guter Übereinstimmung mit den Messungen - wie man auf dem Bild 22 am Pegel Cuxhaven KM725 und dem Bild 23 am Pegel St. Pauli KM623 sehen kann. Lediglich, wird das Hochwasser im letzteren Pegel leicht überschätzt. Der Mannings-Koeffizient für das auch in dieser Fallstudie konstant über das gesamte Gebiet gehalten was zu einer nicht realistischen Abbildung der Bodenreibung führt.

In diesem 3D baroklinen Modell mit Salztransport wurde das *k-epsilon* Turbulenz-Modell verwendet. Die Schichtung über die Wassersäule im Mündungsbereich, die durch die unterschiedliche Salz-Konzentration entsteht, wurde auch realistisch wiedergeben. Bild 24 zeigt den Salzgehalt an der untersten und obersten Schicht am Pegel Cuxhaven (KM 725). Diese Ergebnisse decken sich mit dem Tatbestand aus der ersten Studie.

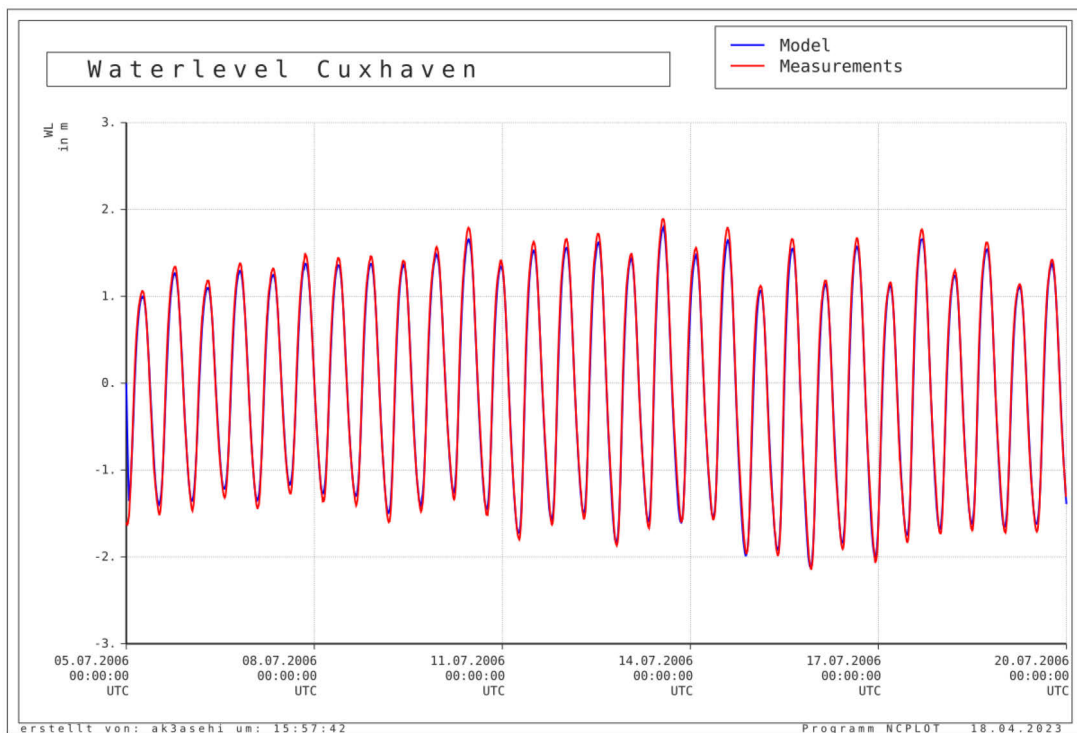


Bild 22: Wasserstand am Pegel Cuxhaven (KM 725) für einen Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006. Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen. Visualisierung mit NCPL0T.

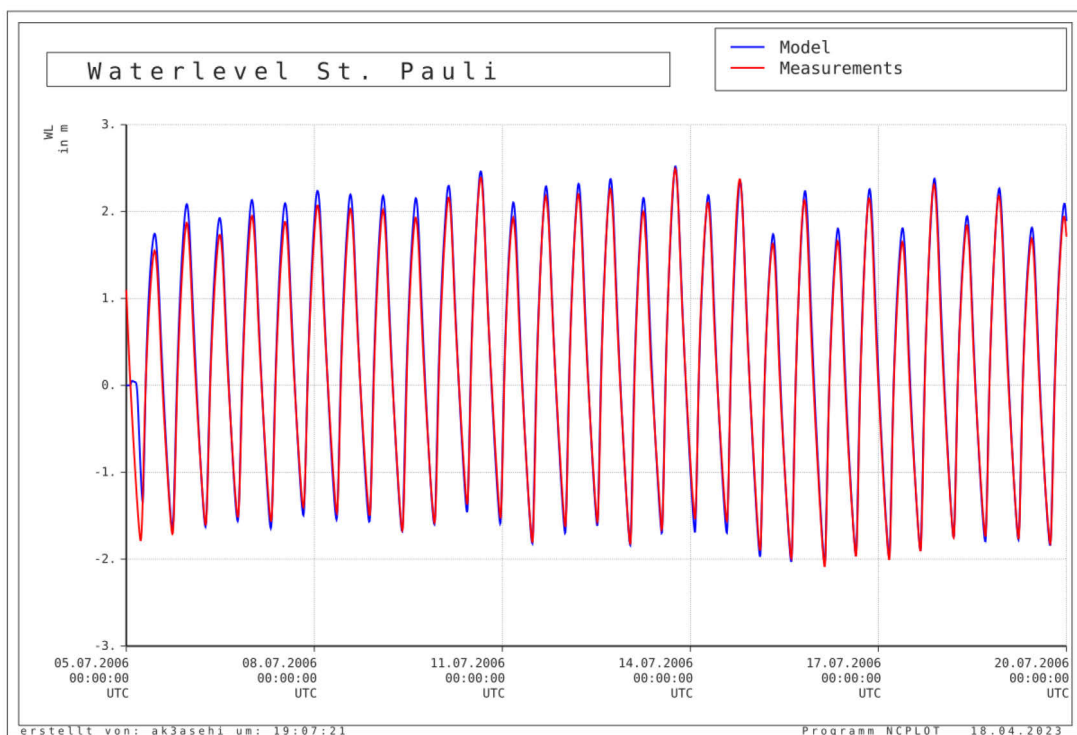


Bild 23: Wasserstand am Pegel St. Pauli (KM 623) für ein Spring-Nipp Zyklus im Juli 2006. Gute Übereinstimmung zwischen Modell und Messungen. Visualisierung mit NCPL0T.

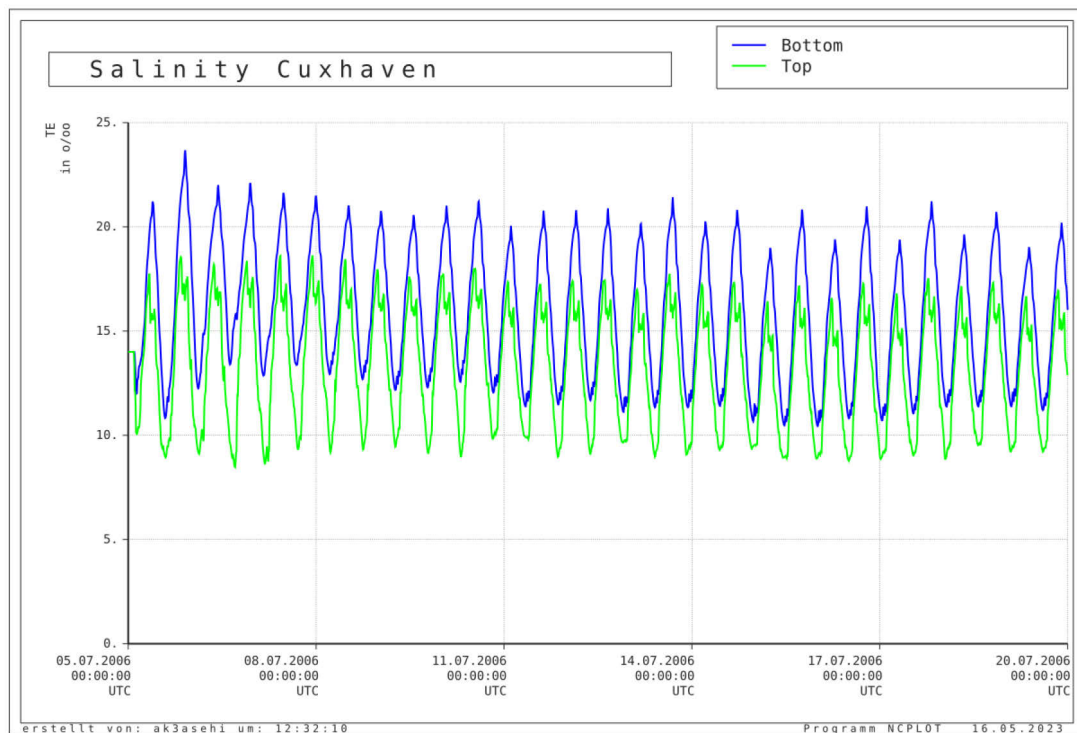


Bild 24: Salzgehalt an der untersten und obersten Schicht am Pegel Cuxhaven (KM 725). Realistische Wiedergabe der vertikalen Schichtung. Vergleichbare Ergebnisse wie die erste Studie (Siehe Bild 9).

4.3 Anpassung und Vereinheitlichung der D-Flow FM Ausgaben

Unstrukturierte Gitter sind in der Ozean-, Küsten- und Ästuar-Modellierung weit verbreitet. Der Datenaustausch zwischen den Modellen ist nach wie vor ein großer Engpass, der in einigen Fällen erhebliche Anstrengungen erfordert. Die Interpolation importierter Daten zwischen Kanten, Knoten und Flächen ist üblich und führt zu einem nicht zu vernachlässigenden Verlust an Genauigkeit. Diese Tatsache war die Hauptmotivation in der BAW für die Suche nach einem Dateiformat, das auf plattformübergreifenden Standards basiert, sicher, robust und flexibel ist und Datenmanipulationen auf der Postprozessierungsschiene ermöglicht.

NetCDF (Network Common Data Form) ist eine gut etablierte und frei verfügbare plattformübergreifende API. NetCDF implementiert eine Reihe von Softwarebibliotheken, die die Erstellung, den Zugriff und die gemeinsame Nutzung von Feldorientierten wissenschaftlichen Daten unterstützen. Es ist auch ein Community-Standard für den Austausch wissenschaftlicher Daten. Das *Unidata Program Center* (<https://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/>) unterstützt und pflegt NetCDF-Programmierschnittstellen für C, C++, Java und Fortran. Programmierschnittstellen sind auch für andere nicht Compiler-basierte Sprachen verfügbar.

Die CF (Climate and Forecast)-Metadaten bieten Standards für die Beschreibung von NetCDF-Daten (<https://cfconventions.org/cf-conventions/cf-conventions.html>) und sind in der Ozean- und Atmosphärenmodellierungsgemeinschaft weit verbreitet. Die Konventionen definieren Metadaten, die eine definitive Beschreibung dessen liefern, was die Daten in den Variablen darstellen, sowie die räumlichen und zeitlichen Eigenschaften der Daten.

Die UGRID Convention (*Unstructured Grid Metadata Conventions for Scientific Datasets*) ist eine vorgeschlagene Erweiterung des CF (Climate and Forecast) Standard für unstrukturierte Gitter. In vielen Fällen, in denen die CF-Konventionen unzureichend sind, werden UGRID Conventions verwendet (<http://ugrid-conventions.github.io/ugrid-conventions/>).

Darüber hinaus ermöglicht UGRID CF NetCDF folgende wichtige Vorteile:

- Sichere Verwendung von Dimensionsdaten dank kanonischer Einheiten des CF
→ Attribut "units"
- Sichere Datentransformation (z. B. von intensiven zu extensiven Variablen)
→ Attribut "cell_methods"
- Filterung nach der Anzahl der Daten (einfache Gezeitenanalyse)
→ Attribut "ancillary_variables" + Attribut "standard_name = number_of_observations"
- Verfolgung der Datenverarbeitungsaktivitäten
→ Attribut "history"
- Gleichwertige Behandlung von Sub-Grid und aggregierten Daten.

Die Ausgaben der mit dem neuen numerischen Verfahren D-Flow FM durchgeführten Simulationen erfolgen u. a. auch im Format UGRID CF NetCDF sehr ähnlich zu UnTRIM. Da aber UGRID noch kein Bestandteil des CF Standards im vollen Umfang, gibt es bei dessen Implementierung in den verschiedenen Simulationsverfahren (UnTRIM, D-Flow FM, ...) Unterschiede. Dies bedeutet für die BAW, dass den erzielten Ergebnissen aus D-Flow FM nicht ohne Anpassungen mit den BAW internen Visualisierung- und Postprozessierung-Systemen bearbeitet werden können. Aus diesem Grund wurde eine Zusammenarbeit mit Deltares im Rahmen eines Kooperationsvertrags gestartet mit dem Ziel eine Anpassung und Vereinheitlichung der D-Flow FM UGRID NetCDF Ausgaben zu erreichen damit eine robuste Kompatibilität mit den BAW-Systemen gewährleistet wird. Die Anpassungen wurden wie folgt eingegliedert:

- Änderung in den flächenhaften Ausgaben (MAP file)
- Änderungen in den Ausgaben an Punkten (HIS file)
- Aufteilung der Ausgabe in 3D und 2D im Falle einer 3D Simulation
- Einführung einiger BAW-interne Metadaten (DMQS) für Datenmanagement und Qualitätskontrolle in den Ergebnisdateien

Die folgende Aufgabenliste (in Englisch) folgt wörtlich den vorgeschlagenen Aufgaben im ursprünglichen Antrag auf Programmentwicklung für die Anpassung und Vereinheitlichung der D-Flow FM Ergebnisse in Zusammenarbeit mit Deltares. Wo zutreffend, sind Erläuterungen oder Änderungen des ursprünglichen Antrags enthalten (kursiv). Mehrere der Änderungen an der Ausgabe werden über die MDU-Ausgabeoptionen konfigurierbar sein.

D-Flow FM MAP files (modifications):

- Add lat/lon coordinates automatically to map files if model coordinates are UTM (or RD).
Realized via a coupling with the PROJ.4 library
- *Note:* standard_name = "sea_water_x_velocity" will be left unchanged, as it is the preferred standard name, and the "x_sea_water_velocity" is an alias¹. Output of scalar current velocity with standard_name = "magnitude_of_sea_water_velocity"
- Full time-dependent 3D output of layer positions (in particular sigma). *Will include layer center coordinates as well as layer interface positions via a bounds-compliant variable*
- Add some ancillary variables to FM variables output: waterdepth to enable flooding/drying thresholds. Similar to what has been done for face-oriented data (mesh2d_waterdepth)
Water depth on edges will be added
- Use canonical units, e. g. "kg m-2 s-1" or "1.e-3" instead of "ppt"

D-Flow FM HIS files (modifications):

- Add lat/lon coordinates automatically to his files (similar as for map above)
- grid_mapping variable missing "projected_coordinate_system"
- z reference in his variables "coordinates" only for 3D data
- All coordinates need to be referenced in his file: variable attributes (both x/y and lat/lon)

Separate 2D and 3D MAP and HIS output files:

- MAP 2D: output of 2D depth averaged data, also in case of a 3D simulation, with own start time, end time, interval. *This will be done for a few relevant variables: salinity, temperature, horizontal velocities.*
- MAP 3D: output of 3D depth structured results in case of a 3D simulation, with own time interval that can be different from the MAP 2D interval. *This is existing functionality.*
- HIS 2D: equivalent to MAP 2D, but with own start time, end time and interval.
- HIS 3D: equivalent to MAP 3D, but with own start time, end time and interval.

DMQS variables and attributes

Several metadata variables can be added to the output. Some of them will be automatically computed by D-Flow FM. Others that are specific to the DQMS can be configured via an additional "metadata template file", which should be delivered by the user as a NetCDF file containing the initial dimensions, attributes and variables. D-Flow FM will then include these file contents into the output file(s).

- Dimensions. Via metadata template file.

¹ <http://cfconventions.org/Data/cf-standard-names/40/build/cf-standard-name-table.html>

- Attributes
 - Global attributes: *geospatial and time domains will be automatically added (based on net file and MDU file). All other example attributes via the metadata template file.*
 - Variable attributes: the coordinate reference system variable has to contain the attribute `epsg_code`.
- Variables. Via the metadata template file.

Die Prozessierung von Analyseergebnissen wird in der BAW von den Programmen NCANALYSE, NCDELTA und NCAGGREGATE durchgeführt. Dabei wird die Qualitätssicherung auf der Basis verschiedener NetCDF-Attribute unterstützt (<https://wiki.baw.de/de/index.php/Hauptseite>).

4.3.1 Tidekennwertanalyse mit dem Post-Prozessor NCANALYSE

Die originalen D-Flow-FM-Ergebnisse, die auf Kronos anhand von der *Singularity Container Image* erzielt werden, können ohne Anpassung mit dem BAW-Analyse-Programm NCANALYSE prozessiert werden. Mit den Programmen DAVIT und NCPLLOT können die synoptischen Daten sowie die prozessierten Daten visualisiert werden. Die flächenhaften Ausgaben aus D-Flow FM werden auch im Falle einer 3D-Simulation in 2D- und 3D-Simulations-Daten getrennt. Somit entsteht die Möglichkeit, tiefengemittelte Daten effektiv zu prozessieren, insbesondere wenn die 3D Daten sehr groß sind. Die erforderlichen DMQS-Variablen wie *file uuid*, *geospatial_coverage*, *time_coverage* und *epsg_code* stehen ebenfalls gemäß den CF-Standards zur Weiterverarbeitung in den Ausgaben zur Verfügung. Weitere BAW-interne Variablen können anhand einer im Voraus erstellte NetCDF Metadaten-Datei von D-Flow FM eingelesen und wieder ausgegeben werden.

Für das realistische Szenario der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006 wurde eine Analyse der originalen D-Flow FM flächenhaften 2D Ergebnissen ohne Anpassung mit den Programmen TDKW, TDKV und TDKS über den Spring-Nipp Zeitraum durchgeführt.

In den folgenden Abschnitten werden ein paar beispielhafte Ergebnisse ohne detaillierte Analyse präsentiert. Das primäre Ziel hier ist die Funktionalität selbst und die Plausibilität der Ergebnisse zu demonstrieren.

TDKW

Die Tidekennwerteanalyse des Wasserstandes mit dem Postprozessor TDKW (<https://wiki.baw.de/de/index.php/TDKWF>) ermöglicht es eine tideabhängige Charakterisierung der Simulation über einen vorgegebenen Zeitraum zu erzielen. Dabei werden relevante und aussagekräftige Tidekenngrößen der Gezeitendynamik im Küstengewässer und Ästuarien wie Tidenmittelwasser (Tmw), Tidehochwasser (Thw), Tideniedrigwasser (Tnw) sowie der damit eng verbundenen Werte für Tidestieg, Tidefall und Tidehub quantifiziert. Die Kerngrößen Flutdauer, Ebbdauer sowie deren Verhältnis ermöglichen Aussagen zur Asymmetrie der Tidekurve.

Darüber hinaus werden für jeden Tidekennwert des Wasserstandes innerhalb des Analysezeitraumes den Mittelwert, Maximalwert und Minimalwert ermittelt.

Die Bilder 25, 26 und 27 zeigen jeweils die Werte des mittleren Tideniedrigwassers, des mittleren Tidehochwassers sowie des mittleren Tidehubs über den Analysezeitraum.

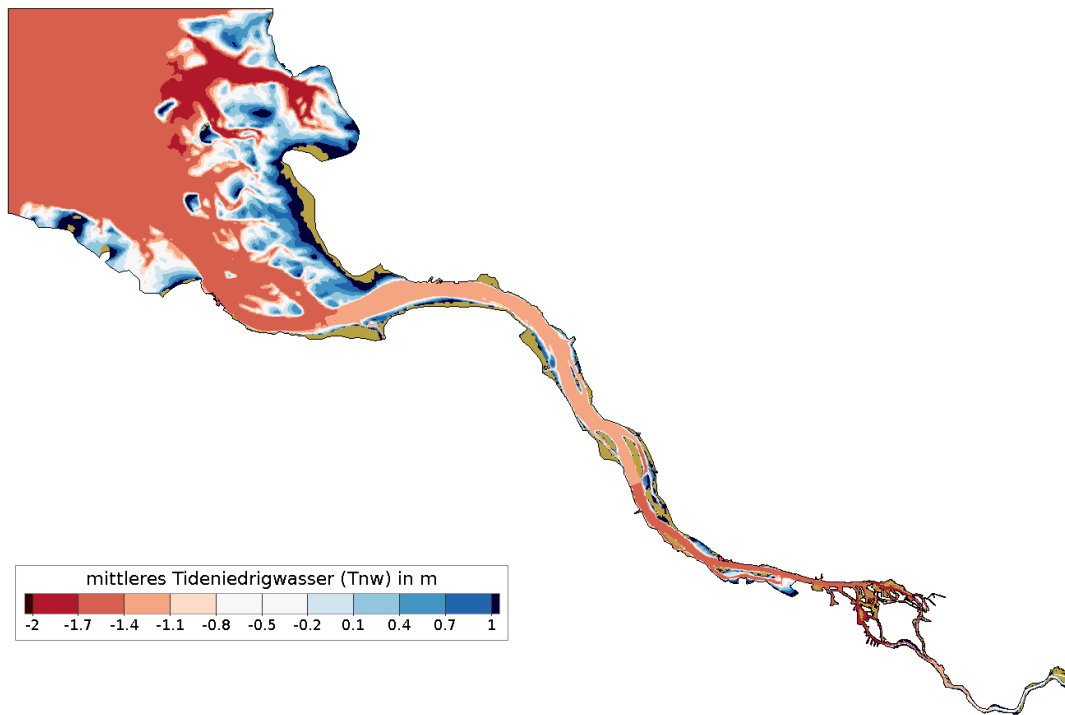


Bild 25: mittleres Tideniedrigwasser für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

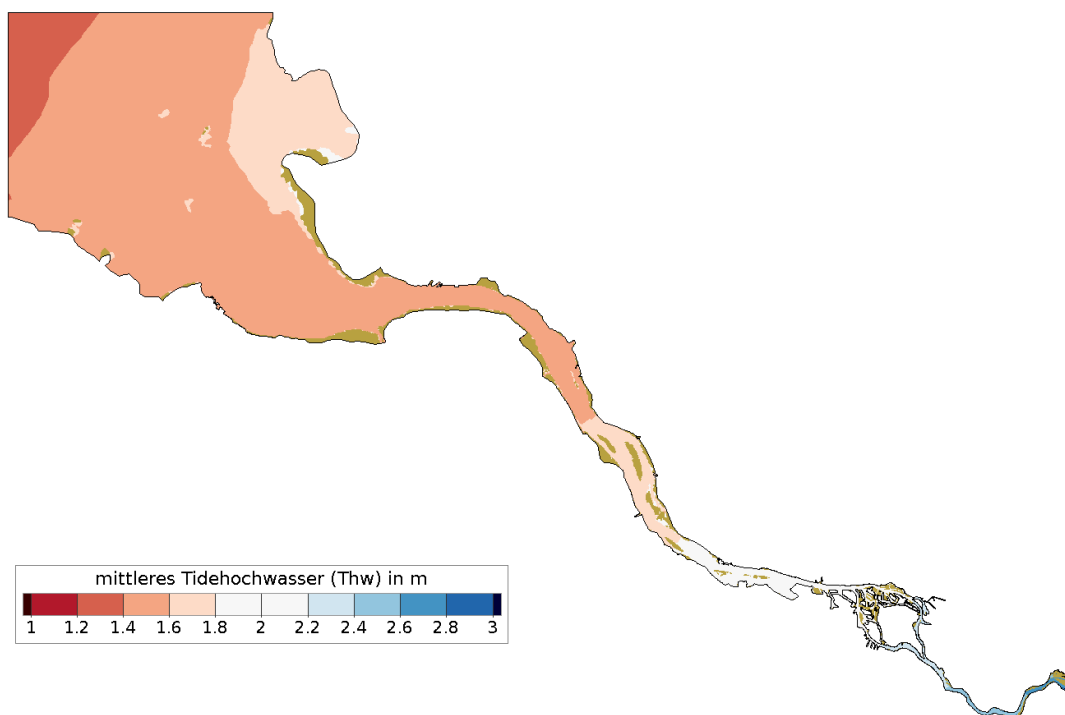


Bild 26: mittleres Tidehochwasser für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

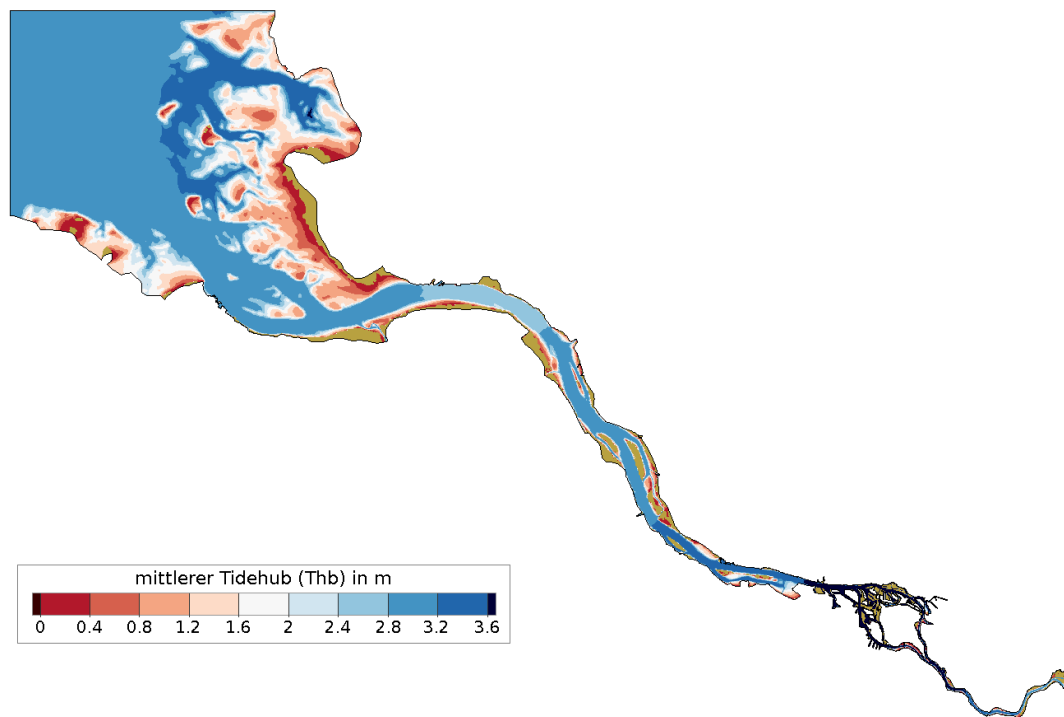


Bild 27: mittlerer Tidehub für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. Der Zeitraum 05.07-20.07.2006 wurde mit TDKW an D-Flow FM originale Ergebnisse analysiert. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

TDKV

Mit dem Postprozessor TDKV (<https://wiki.baw.de/de/index.php/TDKVF>) wird eine Tidekennwerteanalyse der Strömung durchgeführt. Dabei können Kerngrößen wie Flut- und Ebbestromgeschwindigkeiten gerechnet werden, die einen Einblick in die Ungleichheit oder Asymmetrie der Tidephasen verschaffen. Die gerechneten unterschiedlichen Eintrittszeiten der Stromkenterungen sowie die verschiedenen Abstände der Kenterpunkte der Strömung von den dazugehörigen Thw- oder Tnw-Ereignissen können in ihrer Bedeutung von Ort zu Ort unterschiedlich sein. Die für die gesamte Tidedauer gerechneten residuellen Größen ermöglichen Trends für Resttransporte festzustellen. Für jeden Tidekennwert der Strömung werden innerhalb des Analysezeitraumes den Mittelwert, Maximalwert und Minimalwert ermittelt. Auf die Bilder 28 und 29 stehen jeweils die Mittelwerte der maximalen Flut- und Ebbestromgeschwindigkeiten über den Analysezeitraum. Die stärkere Ebbestromgeschwindigkeit an der Elbmündung ab Cuxhaven ist auf Bild 28 zu sehen.

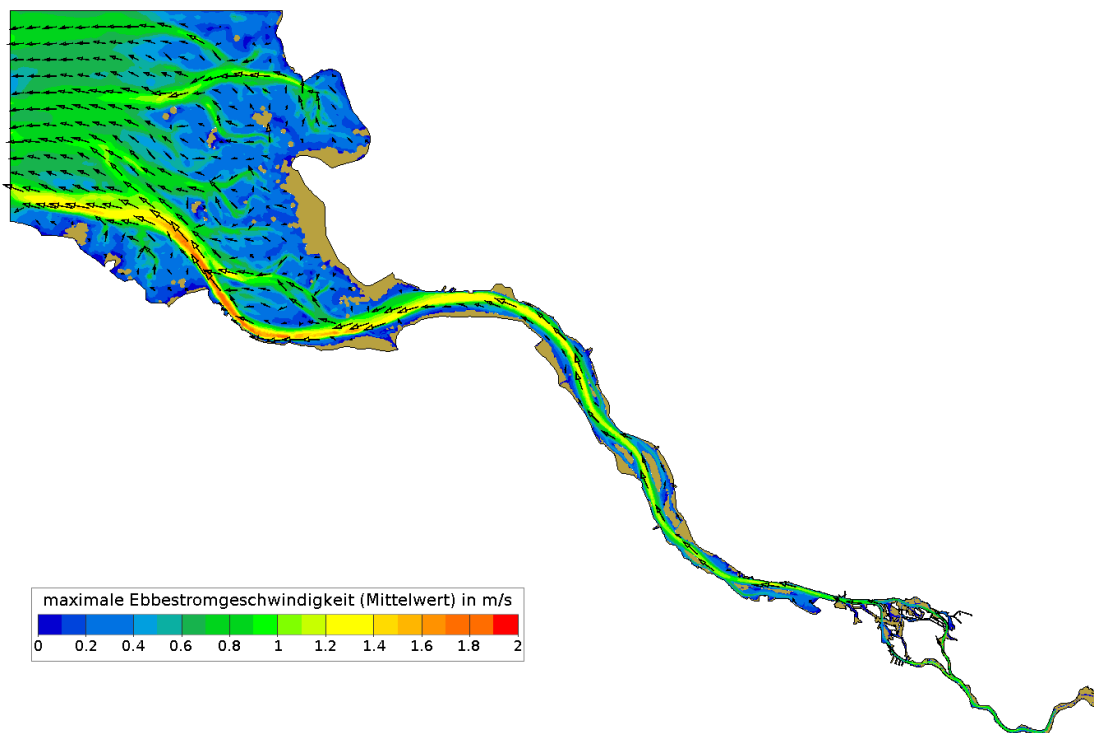


Bild 28: Mittelwert der maximalen Ebbestromgeschwindigkeit für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKV-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

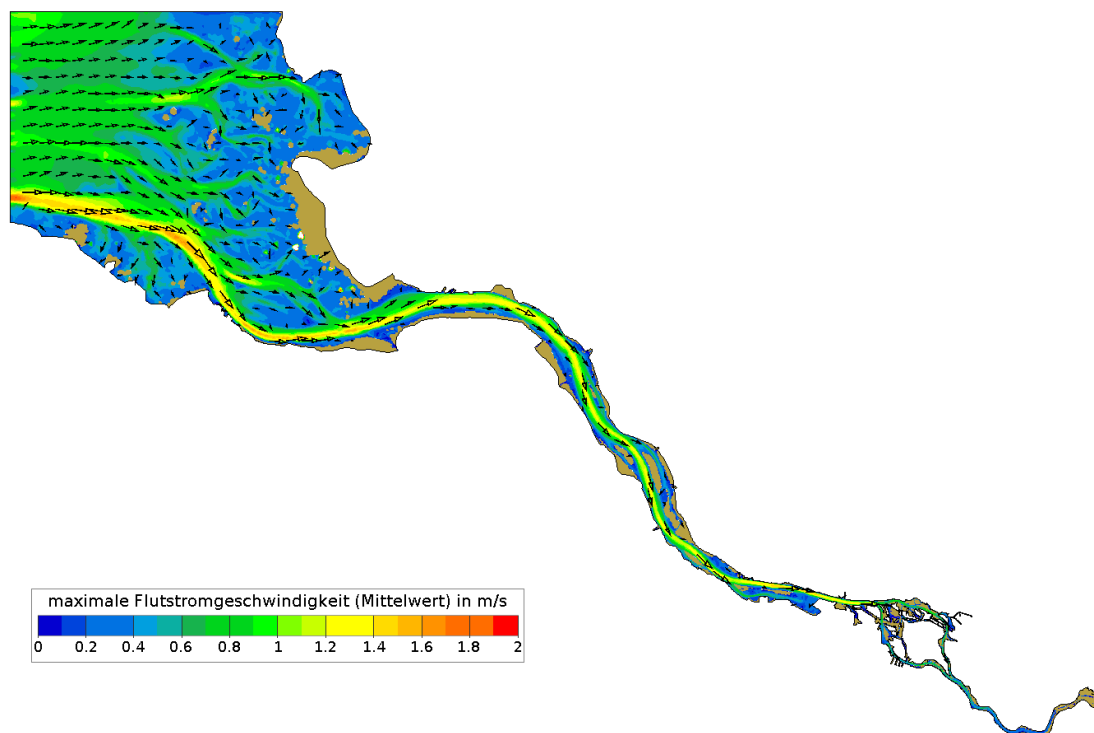


Bild 29: Mittelwert der maximalen Flutstromgeschwindigkeit für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKV-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

TDKS

Die Tidekennwerte-Analyse des Salzgehalts (<https://wiki.baw.de/de/index.php/TDKSF>) mit dem Postprozessor TDKS sowie des advektiven Salztransports ermöglicht es, die räumliche Veränderung des Salzgehalts innerhalb einer Tide sowie den advektiven Transport durch die Strömung, getrennt für den Ebbe- und Flutstrom sowie für die gesamte Tide, in Küstengewässern und Ästuarien zu bestimmen. Darüber hinaus können für jeden Tidekennwert des Salzgehalts innerhalb des Analysezeitraumes den Mittelwert, Maximalwert und Minimalwert ermittelt werden.

Die Bilder 30 und 31 zeigen den Mittelwert des minimalen und maximalen Salzgehaltes für das Szenario der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006.

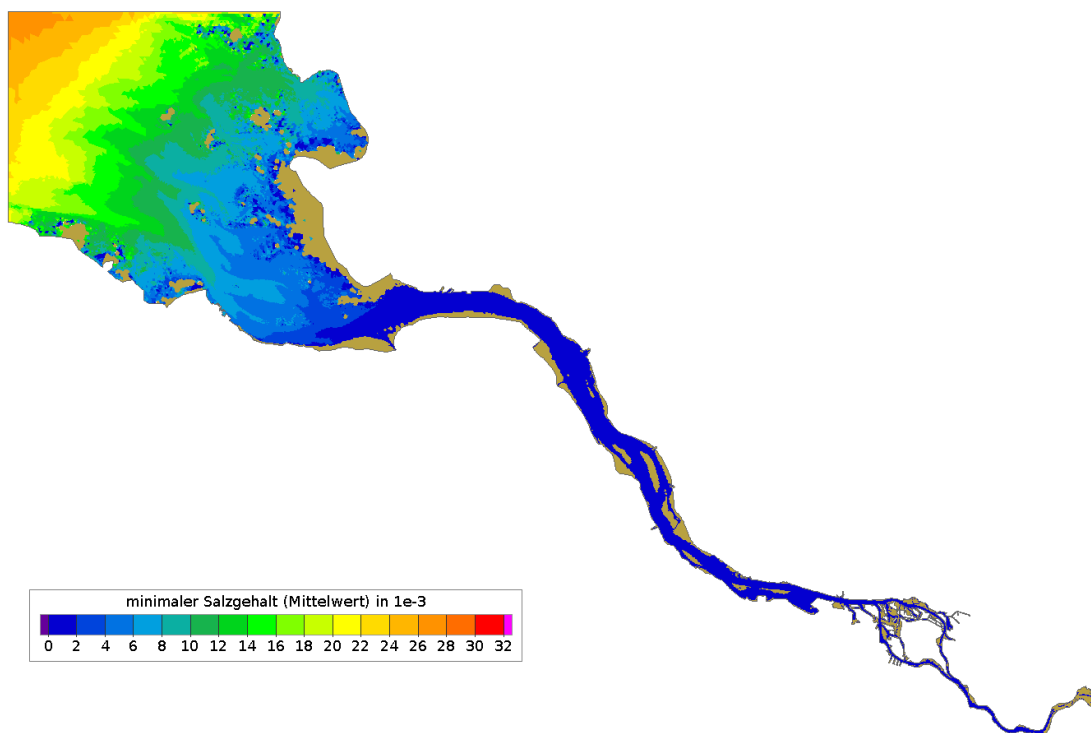


Bild 30: Mittelwert des minimalen Salzgehaltes für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKS-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

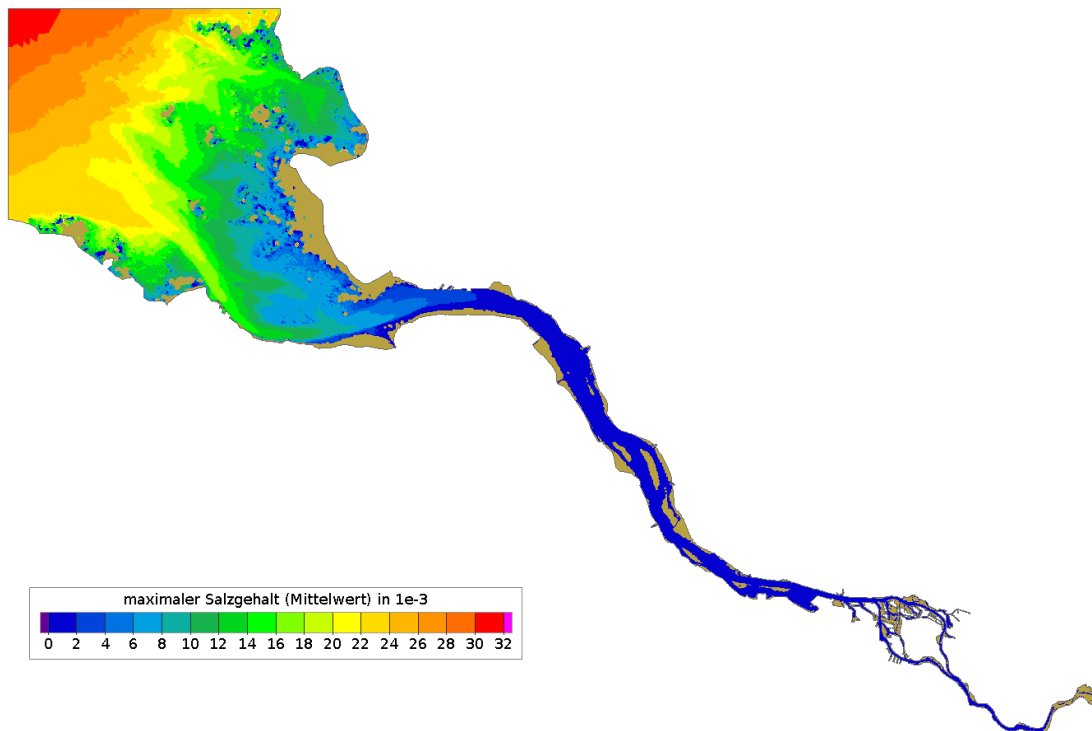


Bild 31: Mittelwert des maximalen Salzgehaltes für das Szenario mittleren Verhältnisse im Sommer 2006. TDKS-Analyse an D-Flow FM originale Ergebnisse. Die braunen Bereiche kennzeichnen die trockenfallenden Gebiete.

4.3.2 Aggregation der Ergebnisse mit dem Postprozessor NCAGGREGATE

Das Programm NCAGGREGATE dient dazu die Komplexität der Ergebnisse zu reduzieren durch die Einführung von aggregierten Kontroll-Volumina.

Die Aggregation kann für folgende Datentypen durchgeführt werden:

- synoptischer Transport-Daten zur präzisen Bilanzierung von Transporten (Wasser, Salz, Temperatur, etc.)
- synoptischer Daten (Wasserspiegelauslenkung, Strömungsgeschwindigkeit, Salzgehalt, Temperatur, etc.)
- Kennwerten
- Differenz von Kennwerten oder synoptischen Daten

Die Kontroll-Volumina zum Aggregieren der Daten werden im Voraus in einer Datei definiert und zusammen mit den NetCDF Ergebnissen für das Programm zur Verfügung gestellt.

Mit dem Postprozessor NCAGGREGATE wurden auch originale D-Flow FM flächenhaften (MAP) synoptischen Ergebnissen der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006 ohne Anpassungen prozessiert. Auf Bild 32 werden die Kontroll-Volumina und Exchange Interfaces angezeigt.

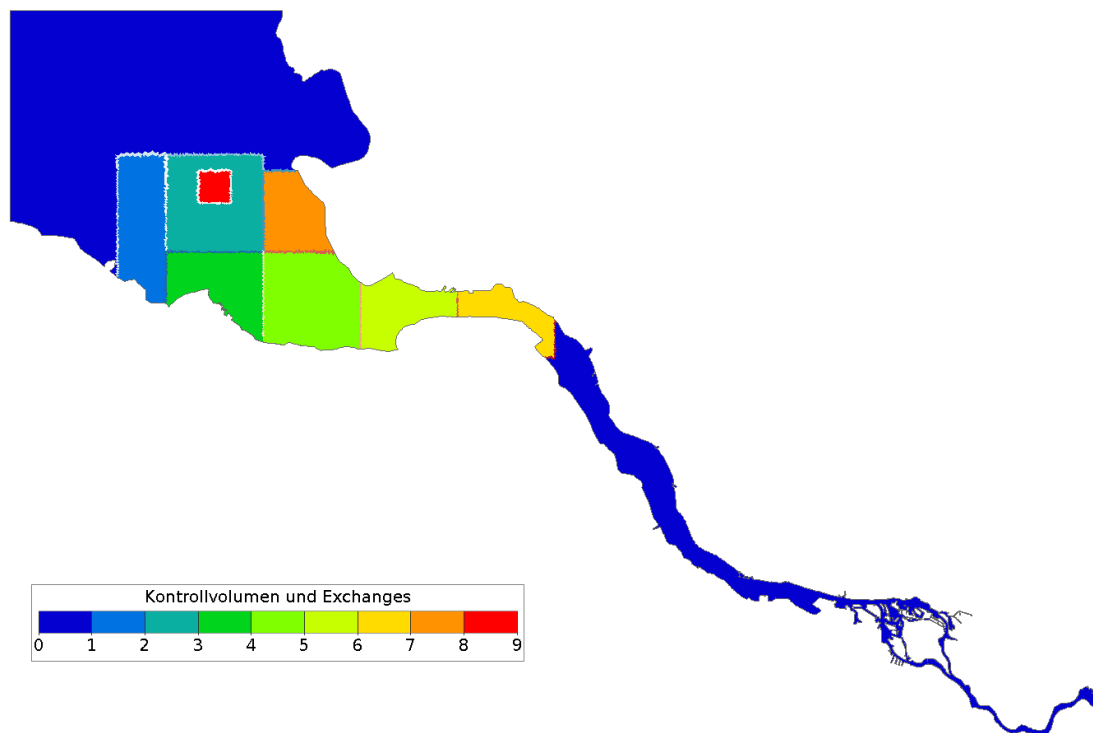


Bild 32: Kontroll-Volumina und Exchanges an der Elbe mit dem Programm NCAGGREGATE. Originale D-Flow FM flächenhaften Ergebnissen wurden prozessiert. Gebiete in Dunkelblau (Nummer 0) sind nicht Bestandteil der Aggregation. Visualisierung mit DAVIT.

5 Integration des DCSM FM (Dutch Continental Shelf Model Flexible Mesh)

DCSM FM ist eine Reihe von Modellen mit Fokus auf der Nordsee, die über die letzten Jahre im Auftrag von der niederländischen Behörde *Rijkwaterstaat (RWS)* durch Deltares entwickelt wurden. Das Gebiet umfasst den nordwestlichen europäischen Kontinentalschelf. Je nach Fragestellungen wurden Modelle mit unterschiedlichen horizontalen und vertikalen Auflösungen aufgestellt.

Die BAW betreibt seit einigen Jahren mehrere kalibrierte DCSM FM Modelle, die von Deltares zur Verfügung gestellt werden, hauptsächlich als Randwerte-Generator für die BAW kleinskaligen Küsten- und Ästuar-Modelle wie das Elbe-Modell oder das Deutsche-Bucht-Modell.

5.1 DCSMv6 FM

Im Sommer 2016 wurde das 2D-Modell DCSMv6 FM in der BAW eingeführt. Dieses Modell wurde von Deltares entwickelt im Auftrag von *Rijkwaterstaat* für *acceptance testing* für das Gebiet nordwestlicher europäischer Schelf und Nordsee und hat damit keinen offiziellen Status. Ziel war es die operationelle Vorhersage für die gesamte Nordsee mit Fokus auf den Niederlanden mit dem neuen Rechenkern D-Flow FM auf einem strukturierten Gitter zu erproben.

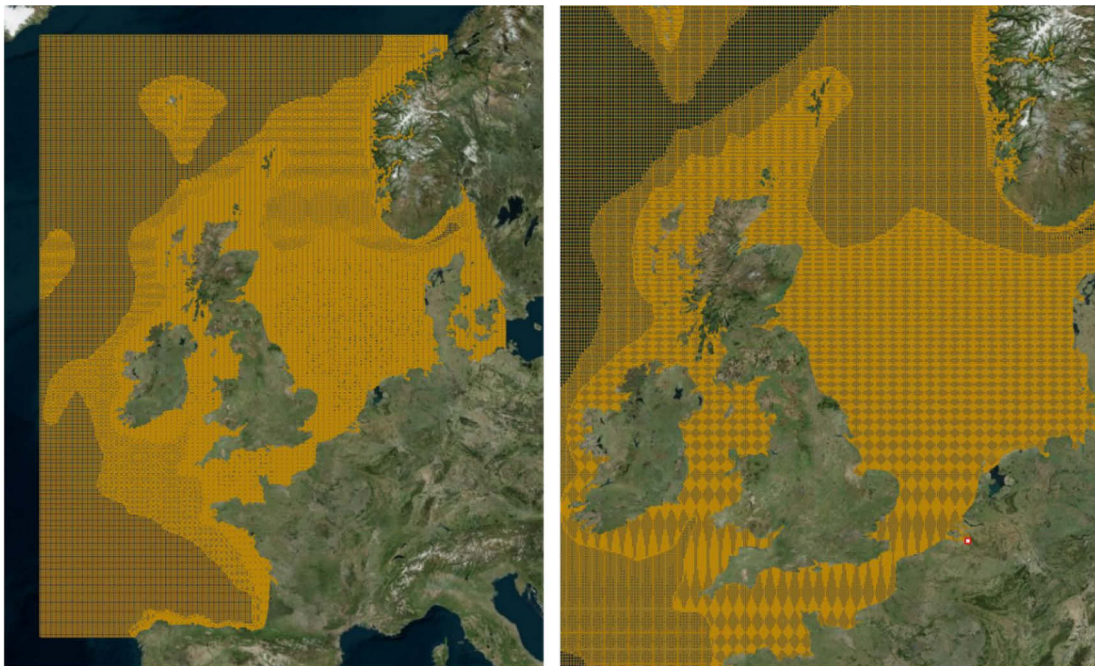


Bild 33: Das Berechnungsgitter des DCSMv6 FM mit Nahaufnahme des Kontinentalen-Schelfs. Tiefere Gebiete haben eine gröbere Auflösung. Visualisierung unter DeltaShell.

Das Modell basiert auf dem existierenden WAQUA-SIMONA Modul und wurde mit räumlich variabler Auflösung (*flexible mesh*) unter der D-HYDRO Suite aufgestellt.

Das Gitter ist in geografischen Koordinaten (WGS84) angegeben und deckt das Gebiet zwischen 15 °W und 13 ° E sowie 43 ° N und 64 ° N. Es besteht aus 353623 Polygonen in 3 räumlichen Auflösungen (siehe Bild 33):

- Eine Seemeile im Küstenbereich und großen Teile des Kontinentalschelfs
- Zwei Seemeilen in der Übergangszone
- Vier Seemeilen im tieferen Bereich

Die Bathymetrie des Modells basiert größtenteils auf dem *North-West Operational Oceanographic System* (NOOS) Datensatz, einer qualitativ hochwertigen gerasterten Bathymetrie. Für Gebiete, die nicht abgedeckt sind, wurden ETOPO2-Bathymetriedaten auf dem Rechengitter interpoliert. Während der Sensitivitätsanalyse und der Parameteroptimierung wurden Änderungen an der ursprünglichen Modell-Bathymetrie vorgenommen, um die Wasserstände und insbesondere die Ausbreitung der Gezeiten besser zu treffen. Außerdem wurde die Bathymetrie entlang der offenen Grenzen geglättet, um Instabilitäten zu vermeiden.

Die endgültige Modell-Bathymetrie ist in Bild 34 dargestellt.

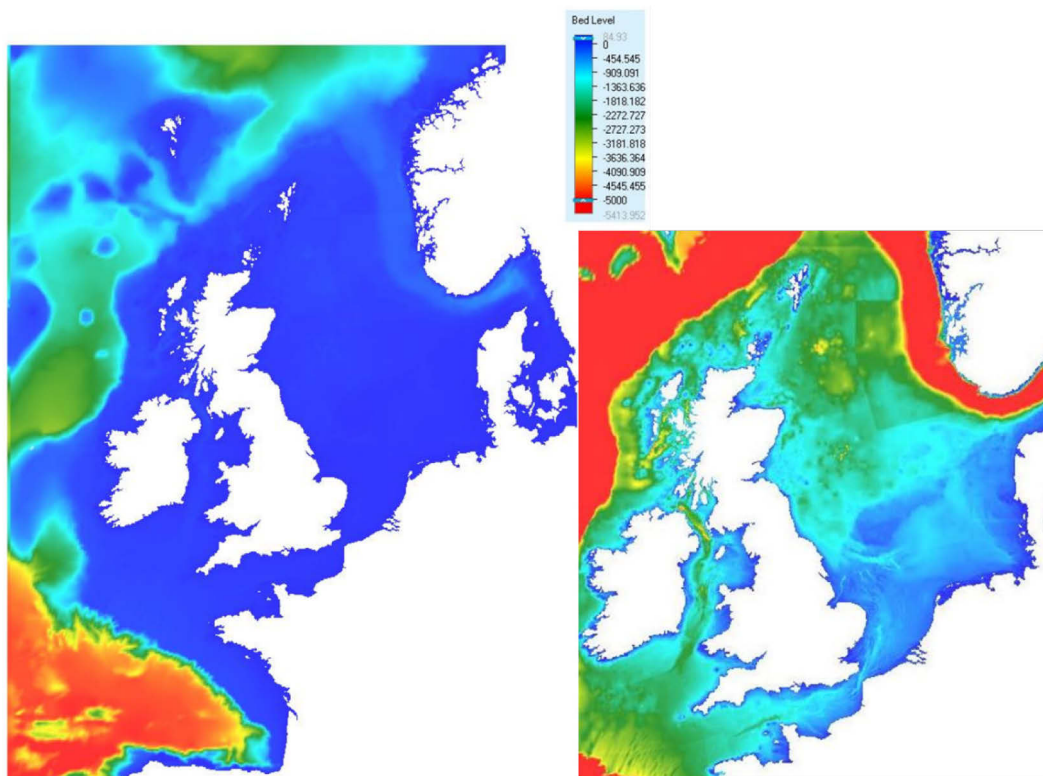


Bild 34: Bathymetrie des DCSMv6 FM Modell mit Nahaufnahme des Kontinentalen-Schelfs. (Tiefen mit MSL Bezug). Visualisierung unter DeltaShell.

Am nördlichen, westlichen und südlichen offenen Modell-Rand werden 208 Abschnitte definiert. An den Stützpunkten der Abschnitte wird der Wasserstand vorgegeben und dazwischen linear interpoliert. Die Wasserstände bestehen aus Partialtiden und Surge. Insgesamt, wurden im Frequenzbereich 38 Partialtiden definiert, die zum größten Teil aus dem GOT00.2 Gezeitenmodell (Ray 1999) und dem FES2012 System abgeleitet wurden. Der Surge wurde als inverse Barometerkorrektur (IBC) im Rechenkern bestimmt basierend auf zeitlich und räumlich variierenden atmosphärischen Druckfeldern. Das Modell beinhaltet auch die Berechnung des Tide-Potentials (*Tidal Generating Forces*).

Für die Dissipation wurden räumlich variierende Manning-Rauheiten (Minimum $0,012 \text{ s/m}^{1/3}$) und horizontale Viskosität verwendet.

Für den meteorologischen Oberflächenantrieb verwendet das Modell zeit- und räumlich variierende Windgeschwindigkeit (in 10 m Höhe) und Luftdruck (in MSL). Die Daten stammen aus dem hochauflösenden Reanalyse-System COSMO-REA6, das auf der Grundlage des Wettervorhersagemodells COSMO vom DWD an der Uni-Bonn entwickelt wurde. Der Reanalyse-Datensatz deckt den Zeitraum von 1995 bis August 2019 ab: Der Datensatz kann unter folgendem Link hochgeladen werden <https://reanalysis.meteo.uni-bonn.de/?COSMO-REA6>

Während der Integration des Systems in der BAW wurde das regionale Vorhersagemodell beim DWD im Sommer 2015 auf das unstrukturierte ICON-EU (ICOsahedral Nonhydrostatic Europa - Regionalmodell) umgestellt. Der atmosphärische Antrieb von DCSM FM wurde folglich darauf

umgestellt. Zusätzlich zur täglichen Vorhersage aus ICON-EU werden auch Analyse-Daten ab dem Jahr 2016 aus der DWD-Datenbank Pamore gezogen.

Die Rohdaten aus COSMO-EU und ICON-EU, die im GRIB2 Format zur Verfügung stehen, mussten in einem D-Flow FM kompatiblen NetCDF Format prozessiert und konvertiert werden (Bild 35).

Auch fremde Datensätze wie z. B. die Daten aus dem OptemS Projekt wurden für Simulationszwecke konvertiert.

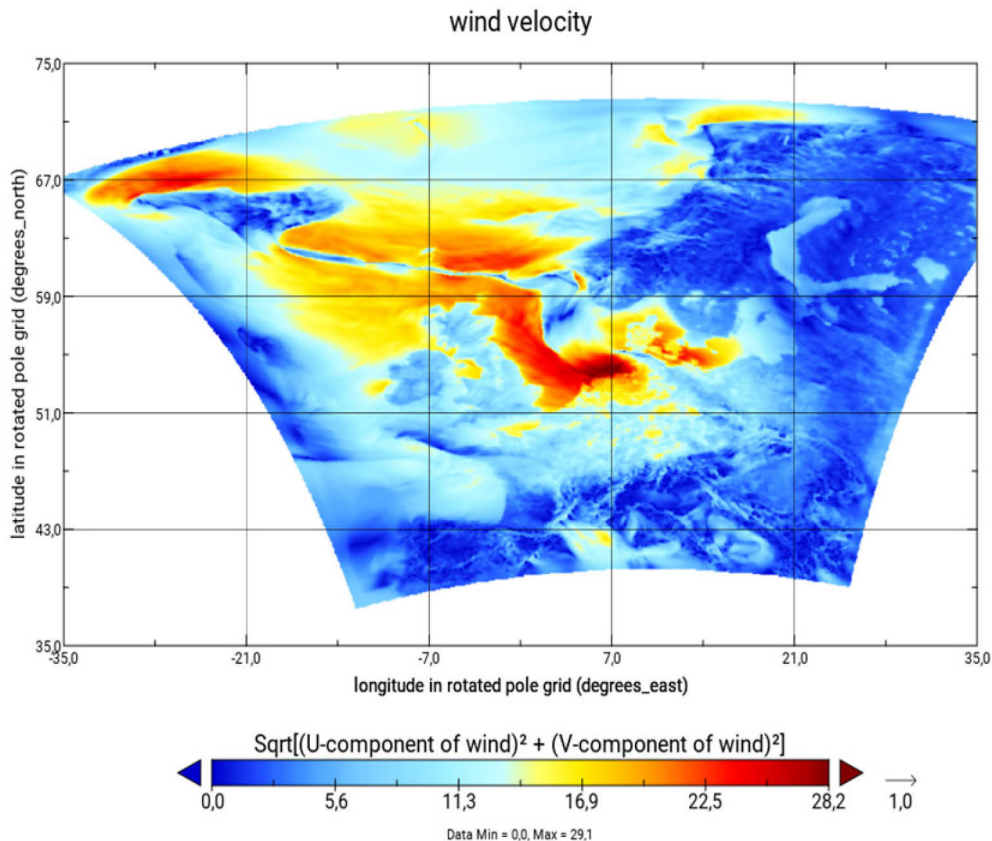


Bild 35: Beispiel für den Betrag der Windgeschwindigkeit U10 aus einem COSMO-EU Datensatz nach der Konvertierung in einem D-Flow FM kompatiblen NetCDF Format.

Die Windschubspannung an der Oberfläche, die den Impulsaustausch mit der Atmosphäre darstellt hängt vom Quadrat der lokalen U10 ab und wurde mit der Charnock-Formel (Charnock 1955) bestimmt, wobei der Charnock-Koeffizient selbst nicht mehr konstant ist, sondern von dem lokalen U10-Windgeschwindigkeit abhängt.

Mit dem kalibrierten DCSMv6 FM Modell wurden zahlreiche Simulationen durchgeführt primär für die Generierung von Randwerten inkl. Klimaprojektionen an den BAW Küsten- und Ästuar-Modelle. Mit DCSMv6 FM als Randwertgenerator wird auch ein operationelles Modell der Deutsche-Bucht GBOM (siehe 5.3.1) betrieben.

Die folgenden Abschnitte erläutern beispielhaft Simulationen mit DCSMv6 FM sowie die Prozessierung deren Ergebnisse.

5.1.1 Beispiel-Simulation: Orkan Capella am 1-3 Januar 1976

Der Orkan Capella, der nach einem hierbei gesunkenen Schiff benannt wurde, gehört zu den stärksten Orkanen des 20. Jahrhunderts. Er zog am 3. Januar 1976 über Mitteleuropa und löste eine schwere Sturmflut an der deutschen Nordseeküste aus. Tabelle fasst die Eckdaten des Orkans zusammen. Mit dem DCsMv6 FM System wurde eine Simulation der Nordsee während des Orkans durchgeführt mit dem Ziel Randwerte für das Küstenmodell zu liefern sowie die Langzeit-Analyse des BAW-Postprozessors NCANALYSE auf den flächenhaften Ergebnissen zu erproben. Der direkte Vergleich mit Messungen wurde nicht angestrebt da er sonst den Rahmen dieser Studie sprengen würde. Die meteorologischen Felder stammen aus dem OptemS Projekt (Simulierung von 10 historischen Sturmfluten an der deutschen Küste).

Tabelle 5: Eckdaten und Folgen des Orkans Capella am 03.01.1976.

Daten	
Bildung	1./2. Januar 1976
Flutspitze	3. Januar, abends
Pegelstand	NN+6,45 m (Pegel Hamburg-St. Pauli, 3.1., abends)
Jährlichkeit (gesamt)	>100
Flut (seit)	höchster je gemessener Stand (Hamburg u. v. a., seit 1825)
Folgen	
Betroffene Gebiete	Nordseeküste, Elbmündung, Wesermündung
Opfer	82 Todesopfer

Das DCsMv6 FM Modell wurde am 01.01.1976 um 00 Uhr kalt gestartet und schwing schnell ein (1,5 Tage). Die simulierten Wasserstände an den Pegeln Bake_A und Cuxhaven (Bild 36) sehen ab dem 03.01.1976 plausibel aus trotz der sehr groben Auflösung (1 Seemeile) im Küstenbereich. Hier muss man allerdings bedenken das eine gewisse Reflexion am geschlossenen Modellrand stattfindet, die zu einer Verstärkung des Signals führen kann.

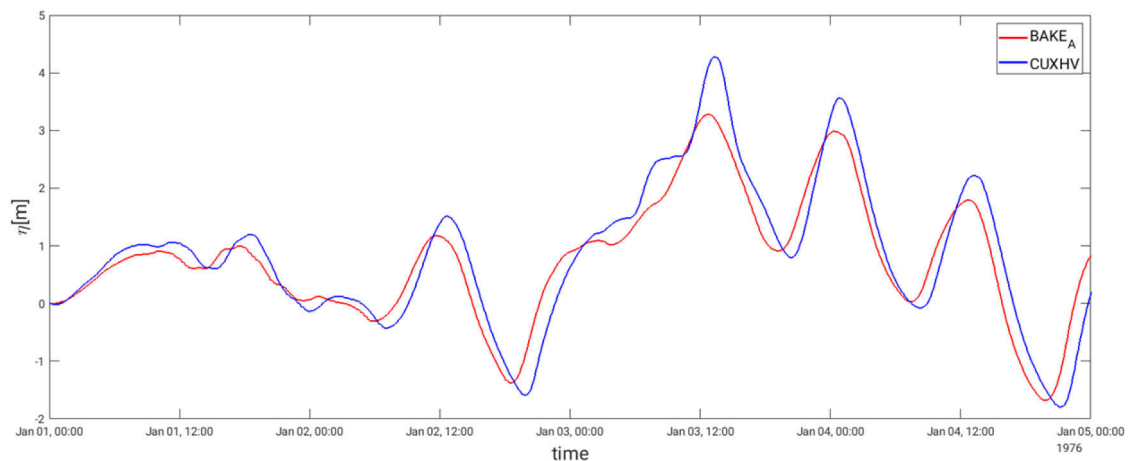


Bild 36: Wasserstände am Pegel Bake_A und Cuxhaven während Orkan Capella anhand einer DCSMv6 FM Simulation. Kaltstart am 01.01.1976 um 00 Uhr. Die Einschwingzeit beträgt etwa anderthalb Tag.

NCANALYSE-LZKW

Mit dem Postprozessor LZKW (<https://wiki.baw.de/de/index.php/LZKWF>) wurde eine Analyse der originalen DCSMv6 FM flächenhaften Ergebnissen (MAP-file) während des Orkans Capella durchgeführt. Die Analyse wurde direkt an den originalen D-Flow FM basierten DCSMv6 FM flächenhaften Ergebnissen (MAP files) eingesetzt. Bilder 37 und 38 zeigen jeweils den Hochwasserstand also der höchste Wert der Wasserstände während des Orkans im gesamten Gebiet sowie den Höhenunterschied zwischen dem Hochwasserstand HW und dem Niedrigwasserstand NW (dem niedrigsten Wert der Wasserstände während des Analysezeitraumes). Es wird klar, wie schwer die Sturmflut an der Deutschen und Niederländischen Küste ausgefallen ist. An der Elbmündung wurden bis zu 5 m Hochwasserstände simuliert.

Die Differenz zwischen dem Hochwasserstand HW und dem Niedrigwasserstand NW im Simulationszeitraum wird maßgeblich vom Hochwasserstand bestimmt.

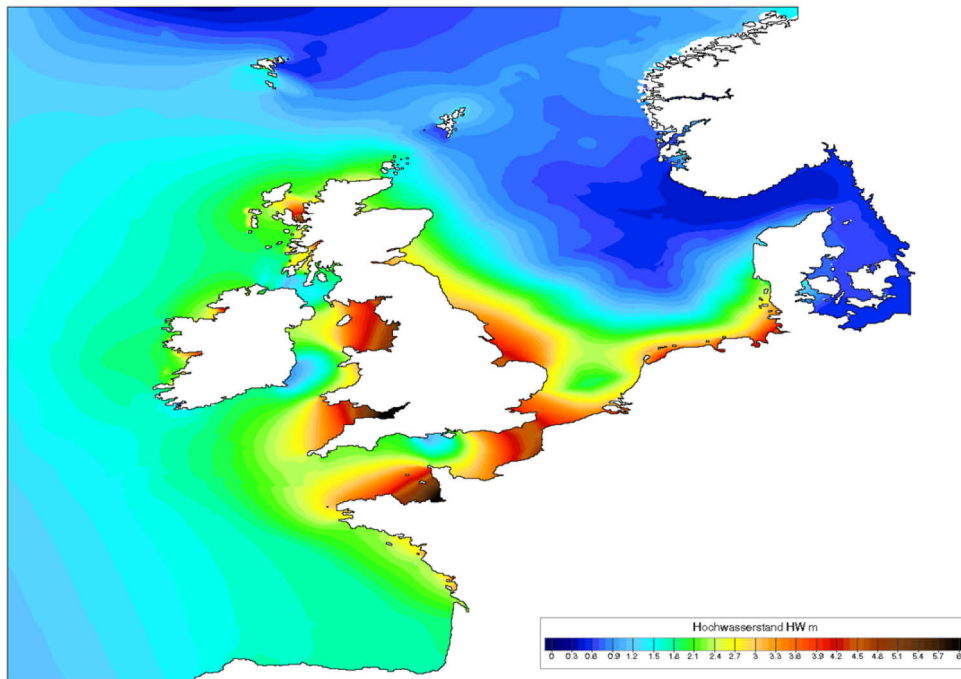


Bild 37: Hochwasserstand im Simulationszeitraum im gesamten Gebiet gerechnet mit LZKW. Das entspricht dem höchsten Wert der Wasserstände während des Orkans. An der Elbmündung erreichen die Werte bis zu 5 m.

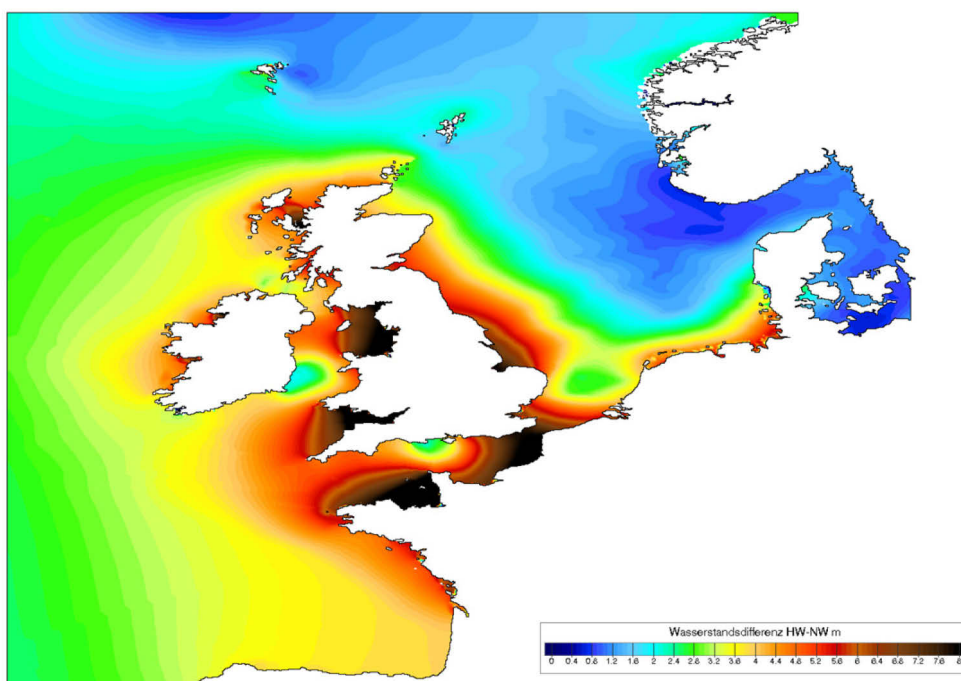


Bild 38: Differenz zwischen dem Hochwasserstand HW und dem Niedrigwasserstand NW im Simulationszeitraum im gesamten Gebiet gerechnet mit LZKW.

5.1.2 Simulation des Jahres 2007 inkl. Klimaprojektion

Für das Jahr 2007 wurden auch Randwerte für das Küstenmodell mit DCSMv6 FM gerechnet. Ein weiteres Ziel der Simulation war es ein Klimaszenario mit Meeresspiegelanstieg zu berechnen. Dafür wurde die Referenzlage des Wasserstandes am Modellrand des DCSMv6 FM durch die sogenannte A0 Partialtide um 80 cm erhöht. Für das Küstenmodell hat die Erhöhung des mittleren Wasserstandes am Rand des übergeordneten Modells den Vorteil, dass all die nicht linearen Effekte im Modellgebiet insbesondere die Bodenreibung im flachen Gewässer mitgerechnet werden und damit ein realistisches MSL-Signal an dem Deutsche Bucht Modellrand eingestellt wird. Der Referenzlauf für das Jahr 2007 ohne MSL liefert eine gute Übereinstimmung mit Messungen. Bild 3 (oben) zeigt eine Vergleich Simulation/Messung für den Zeitraum 15.10.-04.11.2007 am Niederländischen Pegel Terschelling, der direkt am Modellrand des untergeordneten Deutsche Bucht Modells liegt und ein Maß für die Güte der eingesteuerten Randdaten darstellt. Auch die Sturmflut am 02. November wurde hier gut getroffen.

Die eingestellten 80 cm MSL am DCSMv6 Modellrand werden nicht homogen in Terschelling wiedergegeben wie es aus Bild 39 (unten) zu entnehmen. Man beobachtet phasenweise eine Verstärkung des Signals mit Wasserstands-Erhöhungen von bis zu 1m.

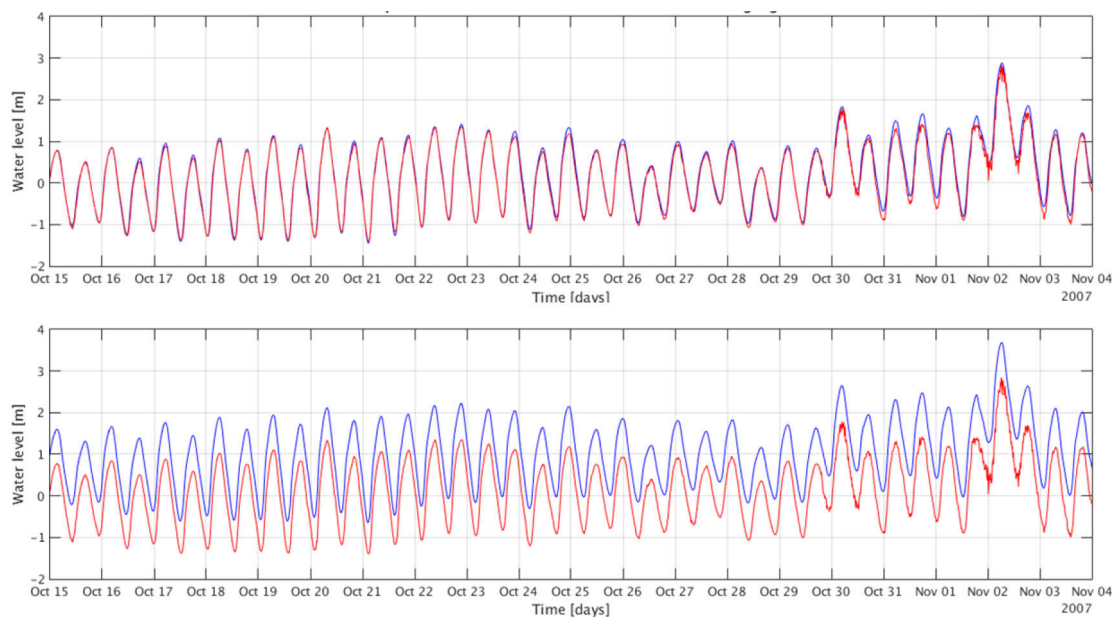


Bild 39: Wasserstand am Pegel Terschelling für den Zeitraum 15.10.-04.11.2007. Vergleich mit Messungen (oben). Szenario mit MSL +80 cm am DCSMv6 FM Modellrand (unten).

5.1.3 Das operationelle Modell GBOM mit DCSMv6 FM als Randwertgenerator

Im Jahr 2018 wurde das operationelle Modell der Deutschen Bucht GBOM (*German Bight Operational Model*) mit DCSMv6 FM als Randwertgenerator aufgestellt. Parallel zur täglichen operationellen 48 Stunden Vorhersage für Wasserstand, Strömung, Salzgehalt und Temperatur an der gesamten Deutschen Küste samt Ästuare, wird auch ein modellbasiertes Monitoring der Fahrrinnenanpassung der Elbe begleitend durchgeführt. Die BAW unterstützt dabei im Einklang mit der behördlichen Auflage zur Planfeststellung die Träger des Vorhabens, die Wasserstraßen- und

Schifffahrtsverwaltung des Bundes (WSV) und die Hamburg Port Authority (HPA), die Wirkung der tidedämpfenden Strombaumaßnahmen zur Verringerung der Ausbauwirkungen nachzuweisen.

Die tägliche operationelle Vorhersage in unterschiedlichen topographischen Zuständen der Bauphase liefert Randwerte und ermöglicht es zeitnah Fragen modellbasiert zu beantworten.

In einem zweiten Schritt wird eine Modellierung unterschiedlicher topographischer Zustände der Bauphase im Hindcast durchgeführt mit dem Ziel eine Tidekennwertanalyse der Modellergebnisse für ausgewählte Zeiträume in der Bauphase zu erstellen sowie Vergleiche mit dem vor Baubeginn-Zustand und mit den Untersuchungsergebnissen aus dem BAW-Gutachten 2006 zu bekommen.

Das 3D Modell GBOM mit Salz- und Temperatur-Transport wird täglich am Rand mit Wasserständen aus DCSMv6 FM getrieben. Dabei spielt das UGRID CF NetCDF Format für Kompatibilitätzwecke eine wichtige Rolle. DCSMv6 FM läuft auch operationell anhand der täglichen meteorologischen Vorhersagedaten des ICON-EU Systems vom Deutschen Wetterdienst (DWD). Für Salz und Temperatur am Rand kommt die tägliche Vorhersage des Nordseesystems BSHcmod des Bundesamts für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH) zum Einsatz. Das Oberwasser und dessen Temperatur in den Ästuaren wird aus Messungen von der Bundesanstalt für Gewässerkunde zur Verfügung gestellt (Bild 40). Bild 41 zeigt auch die Ausdehnung der verschiedenen in GBOM involvierten Systeme auf.

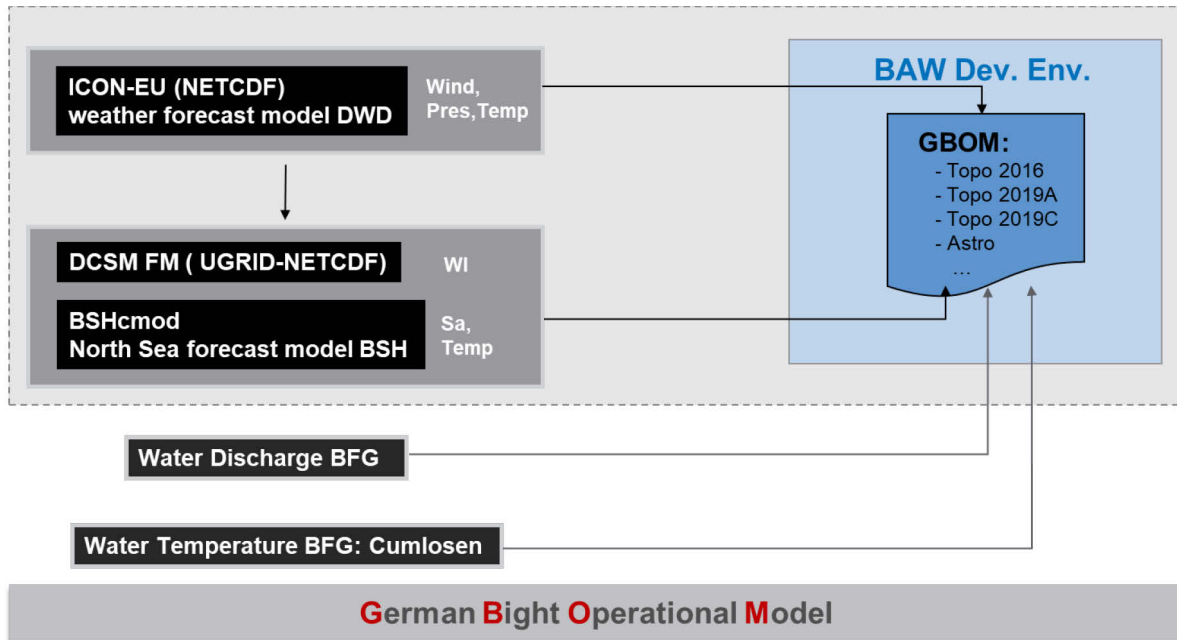


Bild 40: Flussdiagramm des operationellen Modell GBOM.

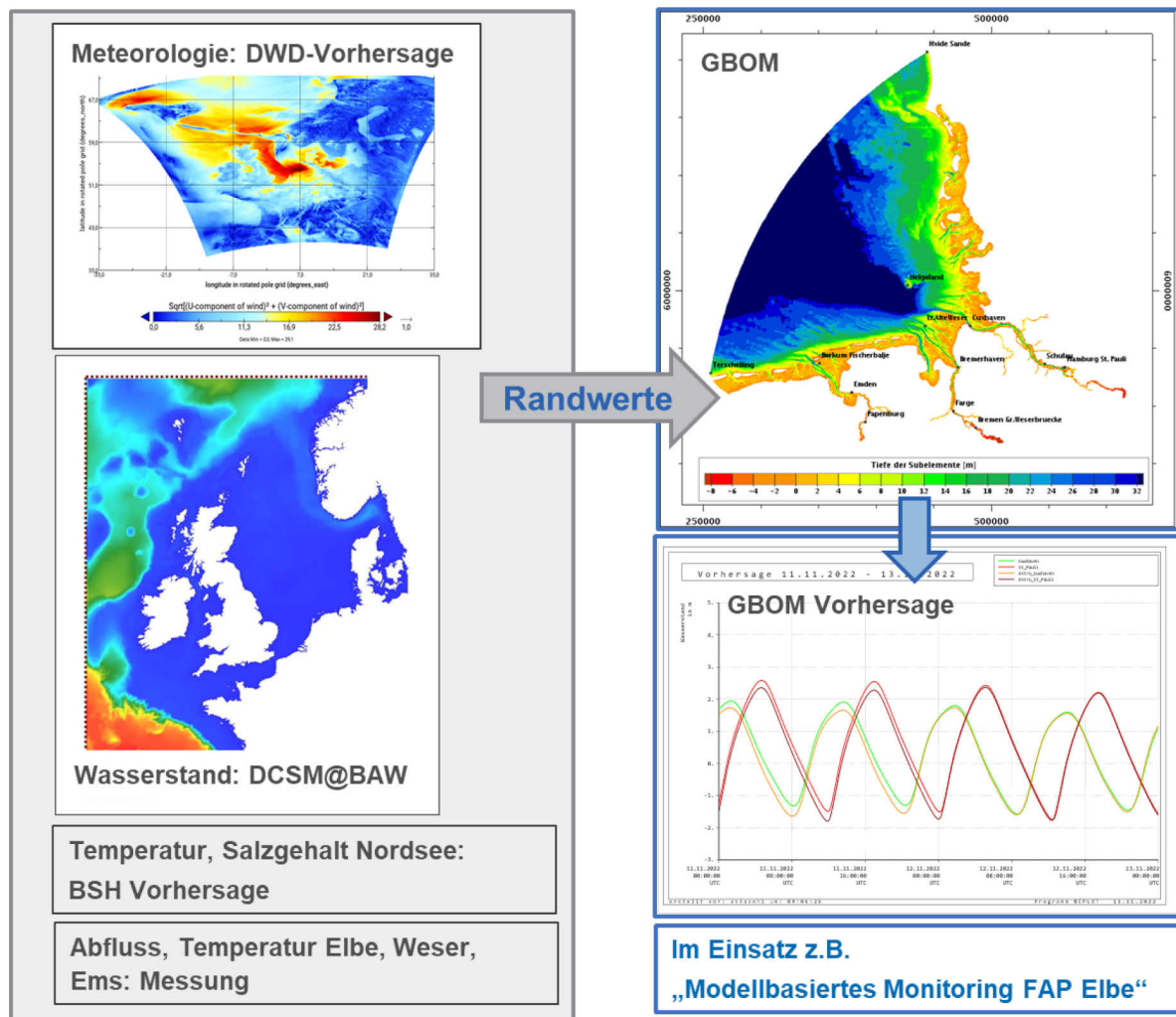


Bild 41: Tägliche Vorhersage relevanter Gewässerparameter durch die BAW mit dem operativen Modell der Deutschen Bucht (GBOM).

5.2 DCSM FM 2D und 3D

Die erzielten guten Ergebnisse mit dem validierten Modell DCSMv6 FM, das nur für Testzwecke entwickelt wurde, haben bewiesen, dass das neue unstrukturierte Verfahren D-Flow FM stabil, robust, akkurat und für die Nordsee-Modellierung gut geeignet ist. Daraufhin hat Rijkswaterstaat Deltares damit beauftragt, basierend auf den Erfahrungen aus der ersten Studie ein hydrodynamisches Modell der sechsten Generation für den nordwesteuropäischen Kontinentalschelf zu entwickeln. Dieses Modell deckt insbesondere die Nordsee und die angrenzenden flachen Meere und Ästuarie in den Niederlanden, wie das Wattenmeer, das Ems-Dollard-Ästuar, die *Wester Schelde* und die *Easter Schelde*. Die Entwicklung dieses Modells (DCSM-FM) wird anhand des neuen Software-Framework D-HYDRO Suite für die Modellierung freier Oberflächenströmungen durchgeführt auf der Basis von unstrukturierten Gittern.

Während die Modelle der vorherigen Generation für dasselbe Gebiet speziell auf optimale Wasserstände für die operationelle Vorhersage unter Tages- und Sturmflutbedingungen abzielten, ist der Anwendungsbereich der Modelle der sechsten Generation weiter gefasst. Diese Modelle

sollten auch geeignet sein für Studien zur Wasserqualität und Ökologie, zur Modellierung von Ölunfällen, für Such- und Rettungsmaßnahmen und zur Bereitstellung dreidimensionaler (3D) Randbedingungen (einschließlich Temperatur und Salzgehalt). Dafür wurden zwei horizontale Schematisierungen vorgeschlagen:

1. DCSM-FM 0.5nm: eine relativ grobe Schematisierung (Mindestgittergröße von 800-900 m in den niederländischen und deutschen Gewässern), die in erster Linie auf ensemblebasierte probabilistische Vorhersagen abzielt, aber auch eine solide Grundlage für die Entwicklung eines dreidimensionalen Modells mit Temperatur und Salzgehalt als Zustandsparameter.
2. DCSM-FM 100m: eine relativ feine Schematisierung mit einer Mindestmaschengröße von ~100 m in einigen niederländischen Gewässern (z. B. im Wattenmeer), die u. a. für die genaue (operationelle) Wasserstandsvorhersage verwendet werden sollte. Dieses Modell basiert auf dem Modell in Punkt 1, aber mit Verfeinerung, wo erforderlich (im Küstenbereich).

5.2.1 DCSM-FM 0.5nm

Das Modell deckt das gleiche Gebiet wie das alte DCSMv6 ab. Die offenen Ränder blieben auch unverändert. Das Netzwerk wurde so konzipiert, dass die Auflösung mit abnehmender Wassertiefe zunimmt. Das daraus resultierende Gitter ist in Bild 42 dargestellt und hat etwa 630.000 Zellen mit einer variablen Auflösung. Die größten Zellen in den tieferen Gebieten haben eine Größe von etwa 4 nm x 4 nm und die kleinsten Zellen eine Größe von 0,5 nm x 0,5 nm in den niederländischen und deutschen sowie in küstennahen Gewässern. Dazwischen sind 2 Zonen mit jeweils 2 nm x 2 nm und 1 nm x 1 nm Auflösung. Bereiche mit unterschiedlicher Auflösung werden durch Dreiecke verbunden.

Die Bathymetrie des DCSM-FM-Modells wurde aus einem gerasterten Datensatz des *European Marine Observation and Data Network (EMODnet Bathymetry Consortium, Oktober 2016)* abgeleitet, einem Konsortium von Organisationen, das europäische Meeresdaten, Metadaten und Datenprodukte aus verschiedenen Quellen zusammenstellt. Die Daten werden zusammengesetzt aus ausgewählten Vermessungsdatensätzen (Einzel- und Mehrstrahlvermessungen) und zusammengesetzten DGMs (siehe Bild 43).

Um den Effekt der Bodenreibung zu berücksichtigen, wurde zunächst ein einheitlicher Manning-Rauhigkeitskoeffizient von $0,028 \text{ s/m}^{1/3}$ angesetzt. Während der Modellkalibrierung mit dem OPENDA-DUD Verfahren wurde dieser Wert angepasst, um eine optimale Wasserstandsdarstellung zu erreichen.

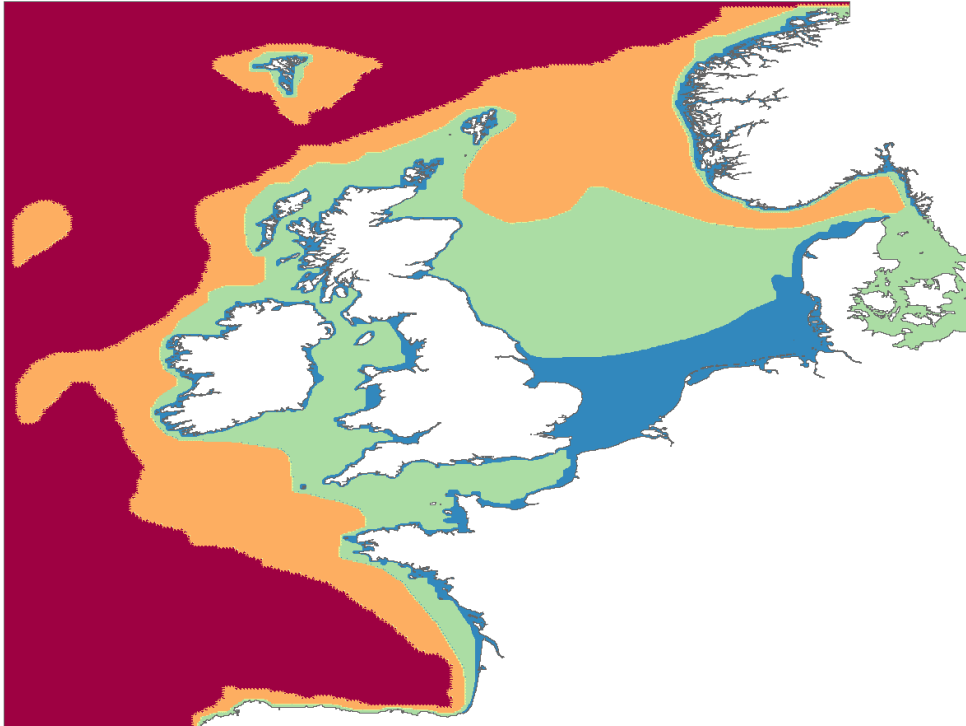


Bild 42: Überblick über das DCSM-FM 05nm-Gitternetz. Die Farben stellen die Gittergröße dar (rot: ~4 nm; orange: ~2 nm; hell grün: ~1 nm; blau: ~0,5 nm).

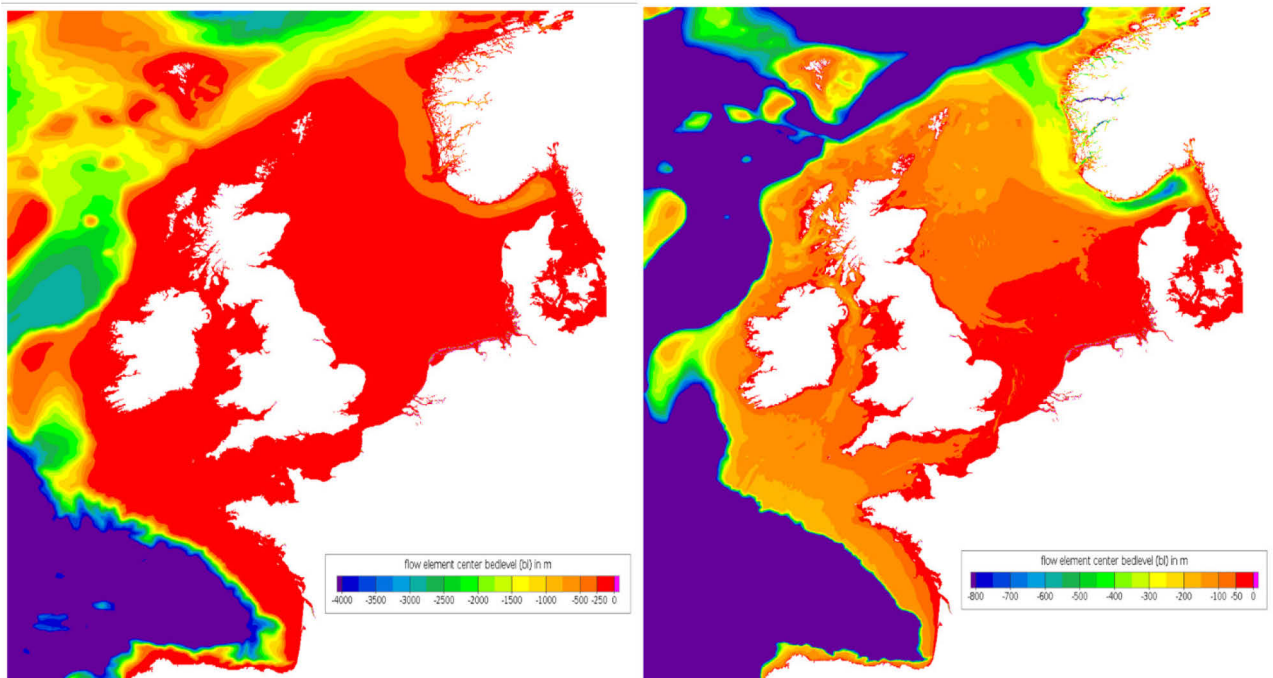


Bild 43: Bathymetrie des DCSM FM05nm Modells. Links: Details der tieferen Gebiete bis 5000 m; Rechts: Details des Kontinentalen-Schelfs ab 800 m. Die Verfeinerung des Gitters wurden annähernd an den Isobathen 800 m, 200 m, 50 m und 12,5 m ausgerichtet.

Entlang des offenen Modellrandes werden an 209 Polygonen Wasserstände, die sich aus Partialtiden und Surge zusammensetzten vorgegeben. Zwischen den diskreten Stellen wird linear interpoliert.

Die Tidewasserstände wurden durch die Amplituden und Phasen von 32 harmonischen Komponenten abgeleitet (Tabelle 2.1). Alle bis auf eine wurden aus dem globalen Gezeitenmodell FES2012 auf einem 1/16 °-Gitter ermittelt. Die 18.6 Jahre Nodal-Tide wird unter der Annahme einer Equilibrium-Tide am Rand explizit gerechnet.

Tabelle 6: Übersicht der vorgegebenen Gezeitenkomponenten an den offenen Rändern des DCSM-FM, einschließlich ihrer Winkelfrequenz (°/h).

Component name	Angular frequency (°/h)	Component name	Angular frequency (°/h)
SA	0.0410686	M2	28.9841042
SSA	0.0821373	LABDA2	29.4556253
MM	0.5443747	NU2	28.5125831
MF	1.0980331	L2	29.5284789
MSF	1.0158958	T2	29.9589333
MFM	1.6424078	S2	30.0000000
Q1	13.3986609	R2	30.0410667
O1	13.9430356	K2	30.0821373
P1	14.9589314	M3	43.4761563
S1	15.0000000	M4	57.9682084
K1	15.0410686	MN4	57.4238337
J1	15.5854433	MS4	58.9841042
MNS2	27.4238337	S4	60.0000000
2N2	27.8953548	M6	86.9523126
MU2	27.9682084	M8	115.9364168
N2	28.4397295		

Zu den Wasserständen an den offenen Rändern wird der Effekt des Luftdrucks (nicht gezeitenbedingt) in Form einer inversen Barometerkorrektur (IBC) addiert. Diese Korrektur ist eine Funktion des zeit- und räumlich variierenden lokalen Luftdrucks.

Das Modell kann mit verschiedenen meteorologischen Modell-Outputs betrieben werden (HiRLAM, COSMO-EU, ICON-EU, ...). Der lokale windgetriebene Impulsaustausch mit der Atmosphäre wird nach der Charnock-Formel (Charnock, 1955) berechnet wobei der Charnock-Koeffizient zeitlich und räumlich von der lokalen Windgeschwindigkeit abhängen kann.

Das Gezeitenpotenzial, das die direkte Anziehungskraft von Mond und Sonne auf die Wassermassen darstellt, wurde eingeschaltet. Die Wirkung dieser *Tidal Generating Forces (TGF)* im gesamten Modellgebiet wird eingeschätzt eine Amplitude von etwa 10 cm haben.

Die horizontale Viskosität wird mit dem Smagorinsky-Ansatz berechnet, wobei der Koeffizient auf 0,20 gesetzt wurde. Damit kann die Viskosität in Zeit und Raum in Abhängigkeit von der lokalen Zellgröße variieren. Mit Ausnahme eines zwei Knoten breiten Streifens entlang der offenen Grenzen wird ein Hintergrundwert von 0,1 m²/s festgelegt.

5.2.2 DCSM-FM 100m

Da der Schwerpunkt von DCSM-FM 100m auf der genauen Modellierung der Wasserstände in den niederländischen Küstengewässern liegt, wurden die Verfeinerungen auf eine Auflösung von etwa 0,25 nm, 200 m und 100 m nur in der südlichen Nordsee verwendet. Infolgedessen ist die Modellschematisierung außerhalb der südlichen Nordsee (Verfeinerungspolygons mit einer Auflösung von 0,25 nm) auf der 50-m-Isobathe, genau die gleiche wie in DCSM-FM 0,5 nm.

Die höchste Auflösung von 100 m gilt für die gesamte niederländische Küste und Ästuar, einschließlich des Ems-Ästuars. Die deutsche Küste wird mit etwa 400 m (0,25 nm) aufgelöst, also vierfach feiner als im alten DCSMv6 FM (siehe Bild 44). Das sich daraus ergebende Gitter hat etwa 1.600.000 Rechenzellen mit einer variablen Auflösung. Die größten Zellen (in Gelb dargestellt) in den tieferen Gewässern haben eine Größe etwa 4 x 4 nautischen Meilen (nm). Die kleinsten Zellen liegen mit etwa 105 m x 115 m entlang der niederländischen Küste.

Das Modell basiert auf denselben Einstellungen wie das DCSM-FM 05nm inkl. Bathymetrie, Randwerte, Bodenreibung und Horizontale Diffusion. Wegen der feineren Auflösung im Küstenbereich müssten weitere Datensätze für dieses Gebiet als Bathymetrie verwendet werden. Entsprechend wurde auch die Land-Wasser-Maske mit weiteren Details inkl. zwei Sperrwerken an der niederländischen Küste bestimmt.

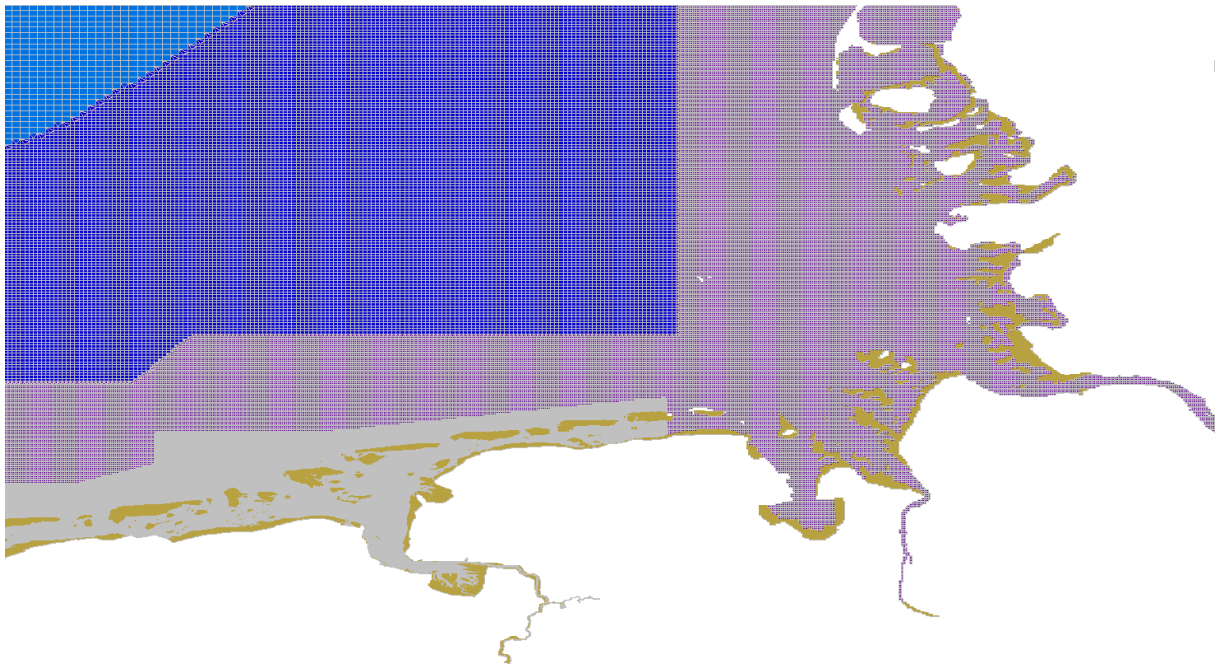


Bild 44: Detail des DCSM-FM 100m Netzes an der Deutschen Küste, wobei die Farben die Gittergröße angeben. Hellblau: ~1 nm; blau: ~0,5 nm, lila: ~0,25 nm, grau: ~200-100 m.

Mit dem kalibrierten DCSM-FM 100 m Modell wurden zahlreiche Simulationen durchgeführt; primär für die Generierung von Randwerten inkl. Klimaprojektionen an den BAW Küsten- und Ästuar-Modelle. Das DCSM-FM 100 m Modell wurde auch als Randwertgenerator für das operative Modell GBOM verwendet.

Der folgende Abschnitt erläutert beispielhaft eine Sturmflut Simulation Anfang 2022 mit DCSM-FM 100m und die Prozessierung der Ergebnisse anhand des BAW-Postprozessors NCANALYSE.

5.2.3 Sturmflut Zeynep

Über einen Zeitraum von etwa einer Woche in Februar 2022 zog eine Reihe von kräftigen Tiefdruckgebieten über Nordwesteuropa und das nördliche Mitteleuropa. Unter ihnen befand sich das Orkantief Zeynep, das am Freitag, den 18. und Samstag den 19. Februar 2022 größere Gebiete West- und Mitteleuropas heimsuchte. In Deutschland waren vor allem Stationen im Norden am heftigsten betroffen. Nicht selten lagen die maximalen Windgeschwindigkeiten zwischen 120 und 130 km/h.

Für die deutsche Nordseeküste, die Unterweser sowie die Unterelbe und die Hansestadt Hamburg bestand für die Nacht vom 18. auf den 19. Februar die Warnung vor einer schweren Sturmflut. In Hamburg trat mit einem Wasserstand von 3,75 Meter über dem mittleren Hochwasser eine sehr schwere Sturmflut ein. An der Station Alte Weser erreichte eine Böe mit 162 km/h die höchste je dort gemessene Windgeschwindigkeit. Bundesweit kamen mindestens drei Menschen ums Leben. Der Flug-, Bahn- und Fährverkehr wurde in weiten Teilen Deutschlands im Verlauf des 18. Februar eingestellt.

Dieses regional historische Naturereignis wurde mit dem DCSM-FM 100m Modell simuliert, das von der ICON-EU Vorhersage des DWDs getrieben wurde. Das gesamte Jahr 2022 wurde gerechnet und der Zeitraum 10.02. - 25.02.2022, der die Sturmflut Zeynep abdeckt, mit NCANALYSE analysiert.

Als erst werden die Zeitreihen am Pegel Cuxhaven-Steubenhöft an der Elbmündung dargestellt. Das Modell mit einer Auflösung von etwa 400 m an der deutschen Küste und in den Ästuaren Elbe und Weser sollte in der Lage sein in den offenen Bereichen an den Mündungen plausible Ergebnisse zu liefern. Auf Bild 41 ist ein Vergleich zwischen den DCSM-FM 100m Ergebnissen und den Pegelmessungen dargestellt. Bei der Sturmflut Zeynep in der Nacht zum 19.02. verhinderte der Wind, dass das Wasser während der Ebbe der Vortide komplett ablaufen konnte, wodurch das Niedrigwasser sehr hoch ausfiel und die folgende Sturmtide sehr hohe Wasserstände erreichte (Bild 41).

Das mittlere Tidehochwasser (MThw) bei Cuxhaven-Steubenhöft liegt bei 1,52 m. Die Sturmflut erreicht einen Sturmflutscheitelwasserstand von 3,72 m (Bild 45). Damit ist sie 3 m höher als das MThw und wird als schwere Sturmflut klassifiziert (Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie). Die Wasserstände wurden insgesamt im Analyse-Zeitraum gut getroffen. Das maximale Hochwasser wurde vom Modell unterschätzt (3.72 m vs. 4.38 m). Die Unterschätzung des maximalen HW während der Sturmflut hat auch das Deutsche Bucht Modell für das Monitoring der Fahrinnenanpassung der Elbe gezeigt. Eine ungenaue Meteorologie, die nur stündlich zur Verfügung steht, oder der fehlende Seegang könnten eine Erklärung dafür sein, aber man kann auch genauso mit einer unzureichenden Kalibrierung des Modells für so ein schwerwiegendes und seltenes Ereignis argumentieren.

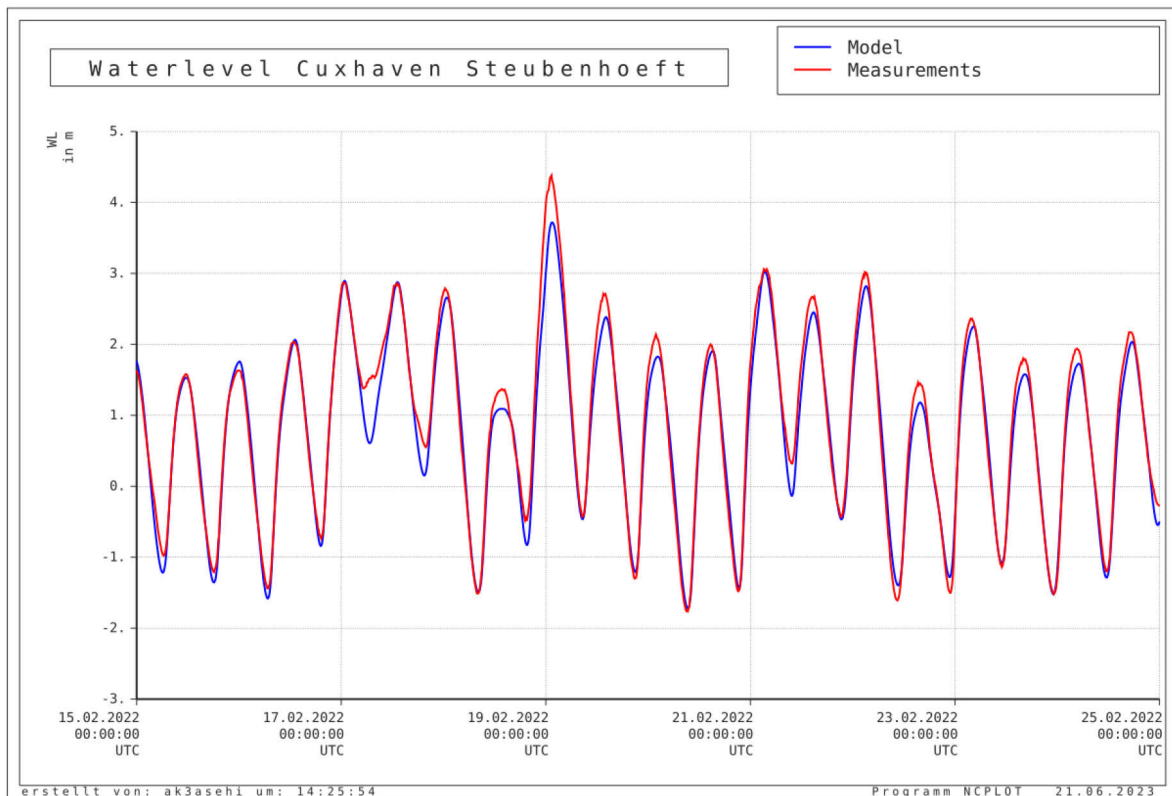


Bild 45: Vergleich Modell (DCSM-FM 100 m)/Messung der Wasserstände am Pegel Cuxhaven-Steubenhoeft für den Zeitraum 15.02-25.02.2022. Die Sturmflut Zeynep ereignete in der Nacht vom 19. auf den 20. Februar.

Die operationelle Vorhersage von GBOM mit DCSM-FM 100m Randwerten lieferte schon in der Nacht zum 18. Februar (siehe Bild 46) eine gute Prognose für die Wasserstände an den Deutschen Pegeln während des Orkans Zeynep.

Mit dem NCANALYSE-Postprozessor LZKW wurde eine Analyse der Sturmflut durchgeführt. In erster Linie stand die Analyse der Ergebnisse in der Deutschen Bucht im Fokus. Das maximale Hochwasser im Analysezeitraum im Elbe-Ästuar entspricht dem beobachteten maximalen Hochwasser während der Sturmflut in der Nacht zum 19.02.2022 mit Werten über 5 m stromauf von Glückstatt wie auf Bild 47 zu sehen ist. Hier muss man bedenken, dass die Reflexionswelle am geschlossen Modellrand in der Nähe von Wedel eine Amplifizierung des Signals verursachen kann und dadurch die Ergebnisse beeinflussen.

Die flächenhafte maximale Strömungsgeschwindigkeit im Analysezeitraum wurde mithilfe des Postprozessors NCANALYSE-LZKV an den originalen DCSM-FM 100m Modellergebnissen ermittelt. In der Deutschen Bucht treten lokal sehr hohe Geschwindigkeiten auf (> 1.8 m/s) insbesondere entlang der Fahrrinne an der Elbmündung (Bild 48).

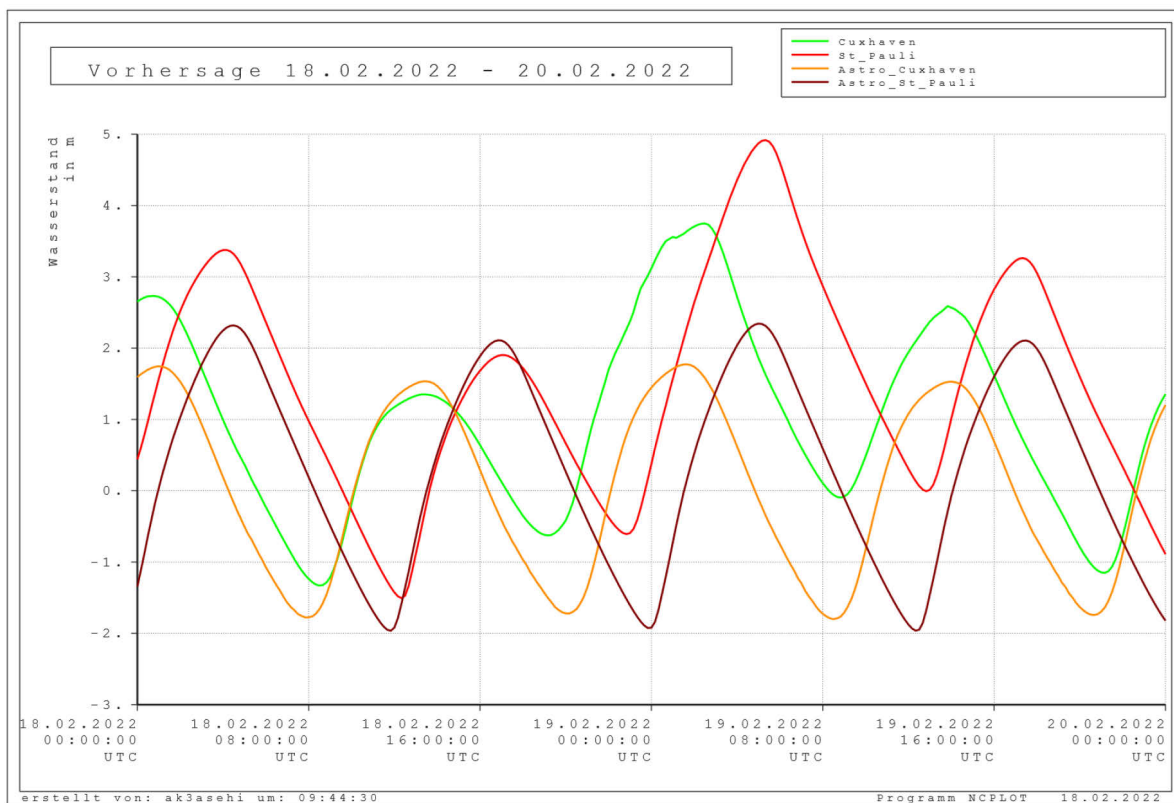


Bild 46: Vorhersage des operationellen Modells GBOM an den Pegeln Cuxhaven und St. Pauli für die Sturmflut Zeynep. Die astronomischen Wasserstände, die den mittleren Verhältnissen ähneln wurden auch zum Vergleich geplottet.

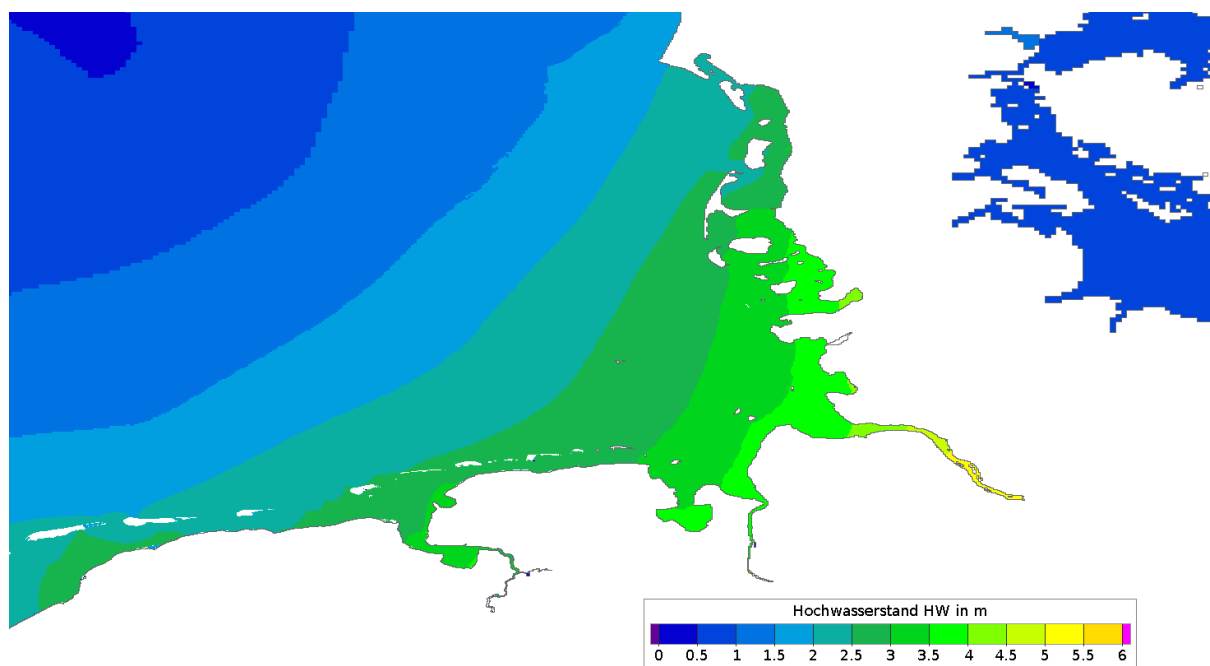


Bild 47: Hochwasserstand im Analysezeitraum an der Deutschen Bucht gerechnet mit LZKW. Das entspricht den höchsten Werten der Wasserstände während des Orkans. An der Elbmündung liegen die Werte zwischen 3 und 4 m.

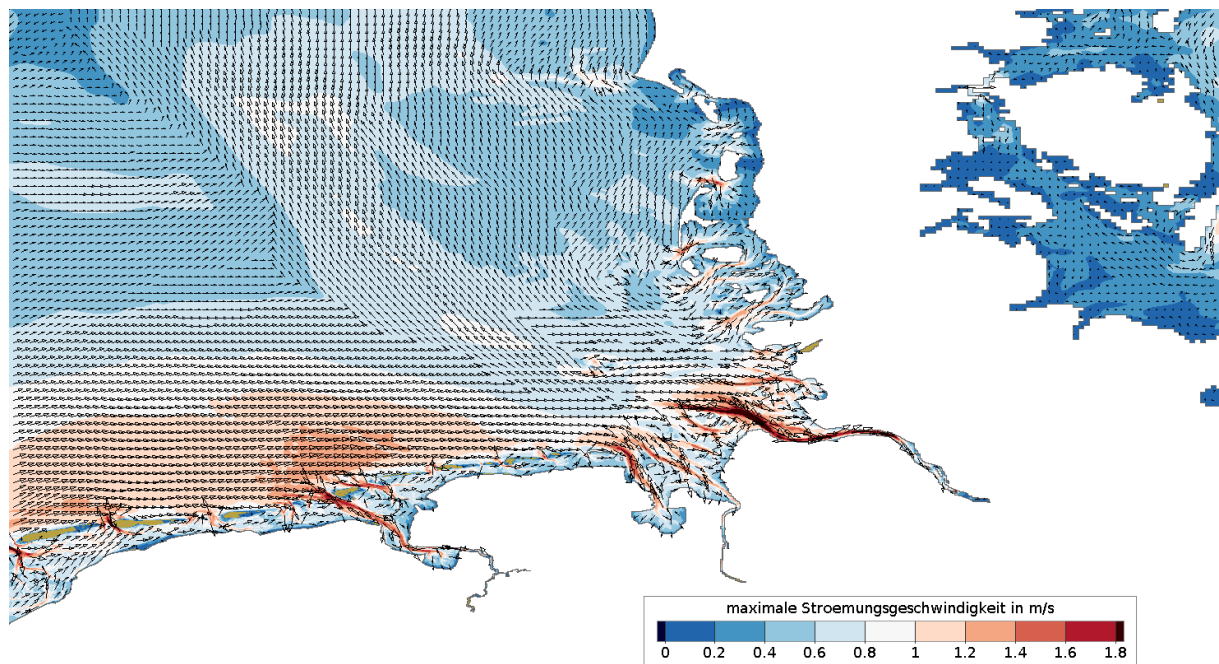


Bild 48: Maximale Strömungsgeschwindigkeit im Analysezeitraum an der Deutschen Bucht gerechnet mit dem Programm NCANALYSE-LZKV. Besonders entlang der Fahrrinne an der Elbmündung treten sehr hohe Geschwindigkeiten auf (> 1.8 m/s).

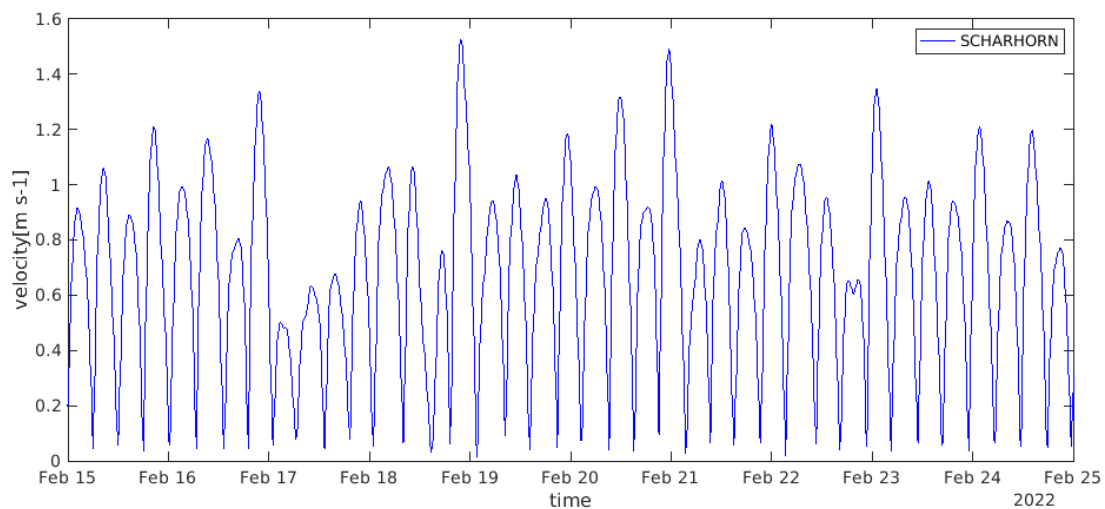


Bild 49: Betrag der Strömungsgeschwindigkeit mit DCSM-FM 100m am Pegel Scharhörn für den Zeitraum 15.02.-25.02.2022. Der maximale Wert wird während der Sturmflut Zeynep in der Nacht zum 19. Februar beobachtet.

Die Zeitserie der Strömungsgeschwindigkeit für den Pegel Scharhörn zeigt, dass der maximale Wert während der Sturmflut Zeynep am 19.02. gegen 00:00 Uhr beobachtet wird (Bild 49).

Die vorhin präsentierten Ergebnisse für die Sturmflut Zeynep zeigen, dass DCSM FM 100 m auch in der Lage ist Extremereignisse an der Deutschen Bucht realistisch zu simulieren.

6 D-Flow FM Benchmarks auf dem Hochleistungsrechner Kronos

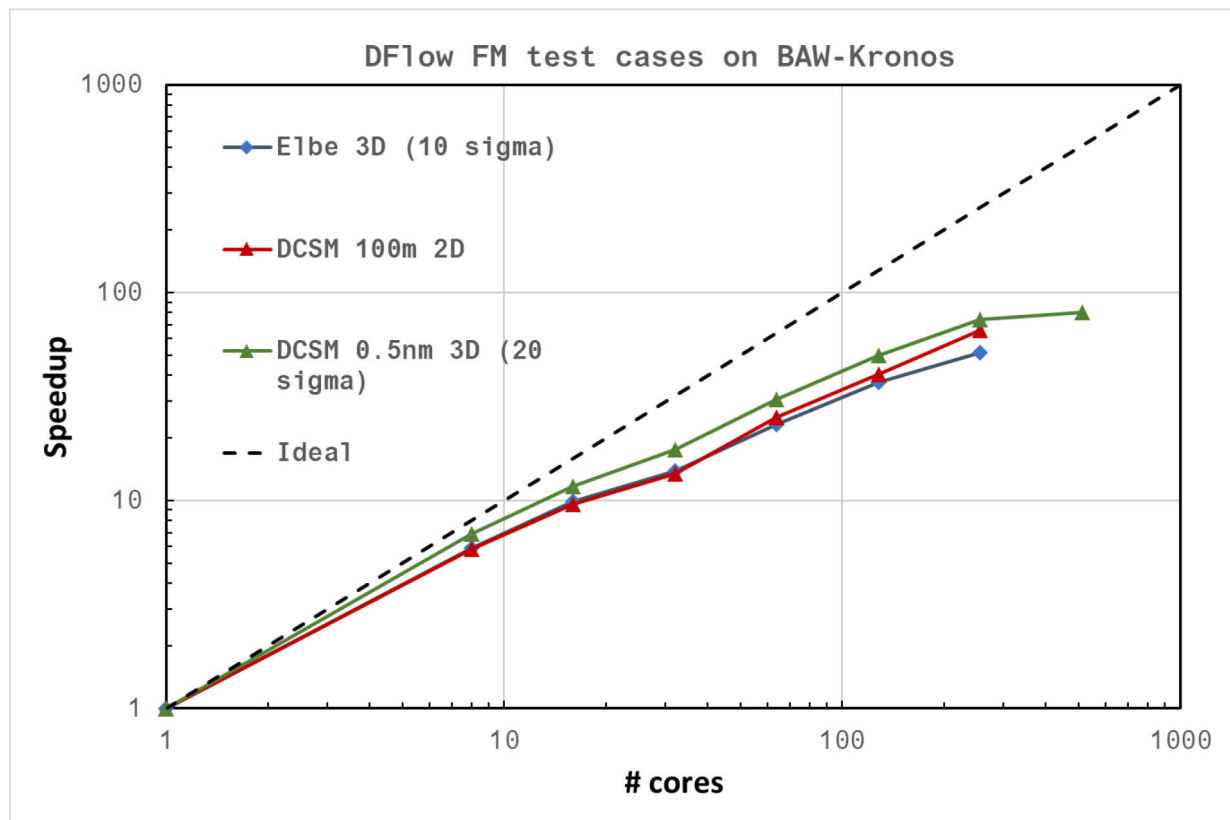


Bild 50: Skalierung verschiedenerer D-Flow FM Modelle auf dem BAW Cluster Kronos. 3D Modelle sind in Sigma-Schichten vertikal aufgelöst. Erzielte Speedup bis zu 512 Rechenkernern.

Eine D-Flow FM Benchmark auf dem BAW Compute-Server Kronos mit dem 3D Elbe-Modell und dem DCSM FM in 2D und 3D wurden durchgeführt. Ziel ist es, Vergleichswerte zu den Ergebnissen aus den Benchmarks, die im Rahmen der laufenden Ausschreibungen für die Ersatzbeschaffung eines neuen Compute-Servers stattfinden, zur Verfügung zu stellen. Dafür wurde eine neue Linux Version auf dem Cluster installiert. Die Läufe wurden mit 8, 16, 32, 64, 128, 256 und 512 Rechenkernen/MPI Prozesse erfolgreich ausgeführt (siehe Bild 50). Die Rechenknoten (à 32 Cores je) wurden im exklusiven Modus benutzt. Die Skalierbarkeit hängt vom Testlauf ab. Flache Gebiete, die trockenfallen wie z. B. an der Elbmündung führen zu einem Last-Ungleichgewicht der MPI Prozesse und mindern dadurch die Beschleunigung. Mit steigender Anzahl der MPI Prozesse steigt der Kommunikations-Overhead und übertrifft ggf. den eigentlichen Rechenaufwand der einzelnen Prozesse. Dieses Verhalten ist ausgeprägter je kleiner das Modell ist (Anzahl der Gitter-Elemente, 2D-3D).

Die Elbe-Benchmark wurde anhand einer *Singularity Image* wiederholt. Ziel war es, das Verhalten der neuen Virtualisierungs-Technologie auf unserem HLR Kronos zu erproben und einen Vergleich zum klassischen Build-System zu erzielen. Um die Benchmark durchführen zu können, mussten erst folgende Herausforderungen überwunden werden:

- Probleme mit der MPI Bibliothek. Verwendung der lokalen (host) Implementierung

- Probleme mit dem Batch System (z. B. Kommunikation mit SLURM via PMI2)
- Richtige Setzung des cluster interconnect (Omnipath, InfiniBand...)

Die Benchmark wurde mit den auf Kronos installierten Intel MPI 2018.0.128 Laufzeitbibliotheken durchgeführt. Spezielle Einstellungen für MPI (host) und den *Omnipath interconnect* mussten exportiert werden. Auch die Kommunikation mit SLURM über PMI2 benötigt weitere *bindpaths*.

```
export FI_PROVIDER=verbs
export I_MPI_PMI=pmi2
export I_MPI_PMI_LIBRARY=/opt/slurm/current/lib/libpmi2.so.0.0.0
```

Der verbs-provider benötigt zusätzlich einige Bibliotheken die nicht in der Standard Intel MPI Installation enthalten sind. Diese wurden dem *Singularity bindpath* hinzugefügt:

```
/etc/libibverbs.d:/etc/libibverbs.d,/usr/lib64/libibverbs/:/usr/lib64/libibverbs
```

Die Läufe wurden mit jeweils 1, 8, 16, 32, 64, 128, 256 und 512 Rechenkernen/MPI Prozesse erfolgreich ausgeführt. Die Rechenknoten (à 32 Cores je) wurden im exklusiven Modus benutzt. Die Anwendung wird mit srun gestartet:

```
srun -n $SLURM_NTASKS --mpi=pmi2 singularity exec {... arguments}
```

Gegenstand der Benchmark war das 3D Elbe Modell mit der Bathymetrie 2016. Hier wurde mit den vertikalen Auflösungen Z- und Sigma-Schichten gerechnet. Die Sigma-Schichten sorgen dafür, dass die Dimension des zu lösende Gleichung-Systems konstant bleibt und nicht durch die Bathymetrie verringert wird wie bei dem Z-Schichten-Modell.

Die Performanz des 3D Sigma-Modells für beide D-Flow FM Versionen (Build and Singularity) ist sehr ähnlich wie aus Bild 51 zu entnehmen. Für das 3D Z-Schichten Modell mit Salztransport sinkt die Performanz erst leicht und dann deutlich ab 128 MPI-tasks. Hier gilt die Anmerkung, die schon in der ersten Benchmark erwähnt wurde nämlich: das 3D Modell mit Z-Schichten hat deutlich weniger 3D Elementen und mit steigender Anzahl der MPI Prozesse steigt der Kommunikations-Overhead und übertrifft ggf. den eigentlichen Rechenaufwand der einzelnen Prozesse. Anders gesagt viele Prozesse vor allem in den flachen Gebieten rechnen weniger, müssen aber trotzdem weiter mit anderen Prozessen kommunizieren und synchronisieren. Dieses Belastungs-Ungleichgewicht führt zu der beobachteten Effizienz-Einbuße. Eine mögliche Lösung wäre hier eine effizientere Partitionierung der Teilgebiete, die diesen Aspekt berücksichtigt und einen Lastausgleichs mit minimale Kommunikationskosten schafft.

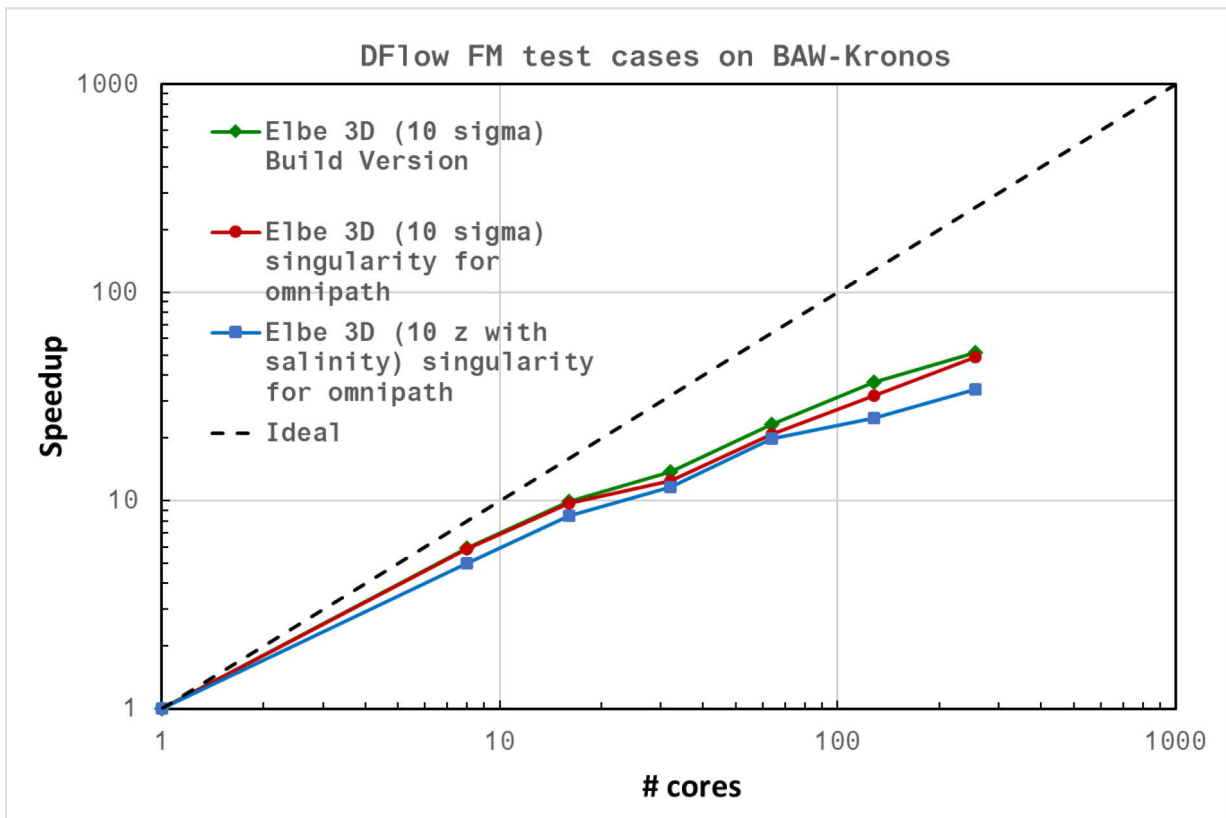


Bild 51: Skalierung verschiedenerer 3D Elbe D-Flow FM Modelle auf dem BAW Cluster Kronos. Vergleich zwischen der Linux Versionen Autoconf-Build und Singularity Image. Ähnliche Speedup bis zu 256 Rechenkern. Das 3D Z-Schichten Modell mit Salz skaliert hingegen etwas schlechter insbesondere ab 128 MPI Tasks.

7 Bewertung und Ausblick

Die im Rahmen dieses FuE-Projektes angestellten Arbeiten und Untersuchungen mit dem neuen Rechenkern D-Flow FM der *Delft3D FM Suite* haben es erlaubt, ein solides Knowhow des Systems in der BAW zu erwerben.

Die Linux Installation des Systems mit Einbindung an der BAW-Rechenumgebung wurde realisiert - sowohl mit dem *GNU Autoconf Build* als auch anhand der neuen *Singularity Container Technology*. Damit war eine frühzeitige Durchführung von intensiven MPI-Rechnungen über längere Zeiträume auf dem HLR Kronos möglich.

Die in diesem Bericht vorgestellten grundlegende Studien, die in den letzten Jahren als *Beta-User* mit verschiedenen Versionen der *Delft3D FM Suite* durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass der neue Berechnungskern D-Flow FM akkurat, stabil, robust und effizient ist.

Es konnte auch gezeigt werden, dass die angepassten D-Flow FM Ergebnisse durch die Implementierung des standardisierten UGRID CF NetCDF-Ausgabeformats mit den BAW-NC-Postprozessoren (NCANALYSE; NCDELTA; NCAGGREGATE) konform sind. Dies war eines der Hauptkriterien für die Integration von D-Flow FM in der BAW.

Zwei Elbe-Modelle, die auf unterschiedlichen Bathymetrien und Gitternetzen basieren, wurden für die 3D-Simulation der mittleren Verhältnisse im Sommer 2006 aufgestellt. Die Ergebnisse zeigten eine gute Übereinstimmung mit den Messungen. Vergleiche zwischen D-Flow FM und dem numerisch sehr ähnlichen Modell UnTRIM zeigten, dass sich beide Modelle ähnlich verhalten. Wichtige BAW-Postprozessoren aus der NCANALYSE-Toolbox (TDKW, TDKV, TDKS) und auch das Aggregationsprogramm NCAGGREGATE wurden auf den ursprünglichen Ergebnissen von D-Flow FM ohne jegliche Modifikation eingesetzt.

Das neu in Deltares entwickelte Nordsee System DCSM FM für die operationelle Vorhersage in den Niederlanden wurde ebenfalls in der BAW integriert und für verschiedene Fallstudien ausgiebig genutzt. Das DCSM FM wurde hauptsächlich als Randwert-Generator für die kleinskaligen Modelle einschließlich das operationellen Modells GBOM verwendet. Die Ergebnisse der DCSM FM Simulationen zeigten außerdem eine gute Übereinstimmung mit Messungen an den Deutschen Pegeln - auch für Extremereignisse wie die schwere Sturmflut Zeynep in Februar 2022. Für Klimaprojektionen mit Meeresspiegelanstieg bietet DCSM FM eine einfache und effiziente Möglichkeit, einen beliebigen Offset des Mittelwassers (MSL) an den äußeren Grenzen weit weg von den Fokusgebieten einzuführen. Damit werden alle nichtlinearen Effekte berücksichtigt und eine realistischere Wasserspiegelauslenkung an den Rändern der kleinskaligen Modelle eingestellt. Mehrere Projekte, wie das BMDV-Expertennetzwerk, konnten von dieser Eigenschaft des DCSM FM profitieren.

Das DCSM FM 05nm 3D mit Salzgehalt und Temperatur wurde ebenfalls für einige Zeiträume getestet. Dieses System wird in naher Zukunft ausgiebig für die Generierung von 3D Randwerte für die kleinräumigen Modelle genutzt werden. Dazu sollen die verfügbaren Daten aus der Copernicus Marine Service (CMES) <https://marine.copernicus.eu/access-data> konvertiert werden.

Die Durchführung von Simulationen über längere Zeiträume erfordert effiziente Systeme, die auf Hochleistungsrechnern HLR eingesetzt werden können. D-Flow FM ist MPI-parallelisiert. Seine

Rechen-Effizienz auf dem BAW-HLR Kronos wurde anhand verschiedener Benchmarks für das Elbe-Modell und für DCSM FM auf die Probe gestellt. Die Skalierbarkeit des D-Flow FM Systems konnte bis zu 256 MPI-Tasks für beide Linux Varianten (*GNU-Build und Singularity*) demonstriert werden.

Die von Deltares beabsichtigte offizielle Freigabe (*General Availability*) der 3D D-Flow FM Hydrodynamik (voraussichtlich August 2023) bahnt den Weg für die offizielle Nutzung des Rechenkerns in Projekten und Forschungsvorhaben in der BAW. Hinsichtlich des 3D Sediment-Transports, der sich immer noch im *Beta-Status* befindet, wird eine Zusammenarbeit mit Deltares angestrebt. Ziel ist es, ein besseres Verständnis und eine genauere Charakterisierung des Sedimenttransports und der Morphologie in der Deutschen Bucht und darüber hinaus in einigen kleinräumigen Gebieten zu erlangen. Dies dient in erster Linie dazu, eine effizientere Strategie für das Sedimentmanagement im Hinblick auf die Entscheidungsfindung bei der Ausbaggerung und Verbringung von Sedimenten oder beim Küstenschutz zu entwickeln.

8 Literaturverzeichnis

Casulli, Vincenzo (2008): A high-resolution wetting and drying algorithm for free-surface hydrodynamics. In: International Journal for Numerical Methods in Fluids 60 (4), S. 391–408.

Casulli, Vincenzo und Walters, Roy A. (2000): An unstructured grid, three-dimensional model based on the shallow water equations. In: International Journal for Numerical Methods in Fluids 32 (3), S. 331–348.

Donchyts, G., Baart, F., Van Dam A., De Goede E., Icke J. und Putten H. Next Generation Hydro Software. HIC 2014: 11th International Conference on Hydroinformatics, New York, USA, 17-21 August 2014

Kernkamp, H. W. J.; van Dam, A.; Stelling, G. S. und de Goede, E. D. (2011): Efficient scheme for the shallow water equations on unstructured grids with application to the Continental Shelf. Ocean Dynamics 61(8): 1175–1188.

Kleptsova, O.; Stelling, G. S. und Pietrzak, J. D. (2010): “An accurate momentum advection scheme for z-level coordinates models.” Ocean Dynamics. 60 (6): 1447–1461.

Kramer, S. C. und Stelling, G. S. (2008): a conservative unstructured scheme for rapidly varied flows. International Journal for Numerical Methods in Fluids 58(2): 183–212.

Platzek, F. (2017): High-performance numerical river modelling using D-Flow Flexible Mesh. Interner Bericht. BAW-Nr. A39530270002.

Sehili, A. (2015): Developing a hydrodynamical model for the Elbe Estuary using Delft3D Flexible Mesh. Next Generation Hydro Software Symposium 2015. Delft, Netherlands, 3-4 November 2015.

Sehili, A. (2018): GBOM. Das operationelle Deutsche-Bucht-Modell. DCSMv6 FM als Randwerte-Generator. BAW-interne Veranstaltung „TV12“, Dezember 2018, Hamburg.

Sehili, A. (2022): Delft3D FM at BAW Hamburg – Current Status and Outlook. Delft Software Days 2022. Delft, Netherlands, 14–16 November 2022.

Seiß G., Weilbeer H. (2006): Anpassung der Fahrrinne von Unter- und Außenelbe an die Containerschiffahrt. Anlage 8: Validierung des Elbmodells BAW-Nr. A3955 03 10062 - H 1 a, 2006.

Zijl, F.; Verlaan, M. und Gerritsen, H. (2013): Improved water-level forecasting for the Northwest European Shelf and North Sea through direct modelling of tide, surge and non-linear interaction. Ocean Dynamics 63(7) July 2013.

Zijl, F.; Sumihar, J. and Verlaan, M. (2015): Application of data assimilation for improved operational water level forecasting on the northwest European shelf and North Sea. Ocean Dynamics 65(12) November 2015.

Zijl, F. (2014): An application of Delft3D Flexible Mesh for operational water-level forecasting on the Northwest European Shelf and North Sea (DCSMv6) NGHS Symposium, Delft Software Days November 2014, Delft, Netherlands.

Zijl, F.; Groenenboom, J. (2019): Development of a sixth-generation model for the NW European Shelf (DCSM-FM 0.5nm) Model setup, calibration and validation. Deltares 11203715-004-ZKS-0003.

Zijl, F.; Groenenboom J. (2019): Development of a sixth-generation model for the NW European Shelf (DCSM-FM 100m) Model setup, calibration and validation. Deltares 11205259-004-ZKS-0001, 2019.

Zijl, F.; Laan, S. und Groenenboom, J. (2021): Development of a 3D model for the NW European Shelf (3D DCSM-FM). Deltares 11205259-015-ZKS-0003, 2021.

(DGJ (2014) Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch, Elbegebiet Teil III. Untere Elbe ab der Havelmündung. Hamburg Port Authority. ISSN 0949-3654) Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch, Küstengebiet der Nordsee 2013. <http://www.dgj.de>.