



HAL
open science

Analyse d'images satellitaires et développement d'outils informatiques pour modéliser le transfert de CO à l'interface air-mer dans les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien)

Mohamed Benallal

► **To cite this version:**

Mohamed Benallal. Analyse d'images satellitaires et développement d'outils informatiques pour modéliser le transfert de CO à l'interface air-mer dans les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien). Traitement des images [eess.IV]. Université de Perpignan, 2016. Français. NNT : 2016PERP0024 . tel-01416967

HAL Id: tel-01416967

<https://theses.hal.science/tel-01416967>

Submitted on 15 Dec 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de
Docteur

Délivré par
UNIVERSITE DE PERPIGNAN VIA DOMITIA

Préparée au sein de l'école doctorale
Energie Environnement - ED305

Et de l'unité de recherche
IMAGES_Espace-DEV

Spécialité :
INFORMATIQUE

Présentée par
BENALLAL MOHAMED ANIS

**Analyse d'images satellitaires et
développement d'outils informatiques pour
modéliser le transfert de CO₂ à l'interface air-
mer dans les régions subantarctique et
antarctique (secteur Australien)**

Soutenue le 19/09/2016

devant le jury composé de :

Mme. El Jai Marie-Claude

Maître de conférences HDR, Université de Perpignan Via Domitia,
France

**Membre du
jury**

Mme. GOYET Catherine

Professeur, Université de Perpignan Via Domitia, France

**Membre du
jury**

Mme. LE BRIS Nadine

Professeur, Laboratoire d'Écogéochimie des Environnements
Benthiques, Banyuls, France

**Rapporteur,
Présidente
du jury**

Mme. LEFÈVRE Nathalie

Chargé de recherche, Université Pierre et Marie Curie, France

**Membre du
jury**

Mme. SOUVERMEZOGLU Ekaterini

Directeur de Recherche, Institute of Oceanography, Hellenic
Centre for Marine Research, Grèce

Rapporteur

M. TOURATIER Franck

Maître de conférences HDR, Université de Perpignan Via Domitia,
France

Directeur



*À ma chère femme Hadjer qui, même en préparant une thèse en même temps que moi, m'a
toujours soutenu et aidé tout le long de cette période ...*

REMERCIEMENTS

Je voudrais en premier lieu remercier les différents agents de l'état Algérien qui m'ont permis de faire ma thèse au sein de l'université de Perpignan Via Domitia, qu'ils soient du ministère de l'enseignement supérieur, du ministère des affaires étrangères ou bien encore des services consulaires en France ; car tous, chacun de leur côté ont contribué à la bonne tenue de mes trois années de thèse et ont veillé à l'avancement de celle-ci.

Un remerciements spécial à Mme Gisèle Canal ainsi qu'à ces collègues du service universitaire des relations internationales de l'UPVD pour leur accueil des premiers jours, leur professionnalisme dans le suivi de notre formation ainsi que leur support moral tout le long de mon séjour.

Mes remerciements vont aussi aux membres de ma famille, mes parents Nasser et Hadja Arbia, ma soeur Chahinez, et à tous mes cousins. A mon meilleur ami, que dis-je ? mon frère Abdelmadjid. A ma belle famille Kacem, Fatiha, Kaouther et Omrane.

J'aimerai aussi remercier mes amis qui m'ont accompagné tout au long de la thèse et que je n'oublierai jamais ; Chemseddine Chohra, Rawa Hassan EL Fallah, Nasrine Damouche, Hugues De Lassus Saint-Genies, Abdelkrim Gacem Chaouch, Rafife Nheili, Alexis Julieth Vásquez Tapias, Khaled Sebabiban, Cedric Falco, Elissar Gemayel, Abed El Rahman Hassoun, Jannine Marquez Lencina Avila, Abed Hammou, Virginie Casadei, Françoise petit, Florence Vouvé et Christophe Canal.

Mes remerciements vont aussi à mon encadrant Franck Touratier, mais aussi à Catherine Goyet, Veronique Guglielmi, Maud Loireau Delabre et Jacqueline Boutin qui chacun à leur tour ont contribué à cette thèse et à préparation de la soutenance. J'aimerai aussi remercier tous les membres du jury qui ont accepté l'effort de prendre en charge et de juger mon travail.

Un grand merci aux membres de l'école doctorale et spécialement à notre chère Jocelyne Pla qui nous a toujours accueillis avec le sourire et nous a aidé dans nos démarches administratives sans oublier le directeur de l'ED, Mr Didier Aussel, qui a toujours été disponible et à l'écoute durant mon doctorat.

RÉSUMÉ

L'avènement des satellites et les données recueillies par ces derniers ont bouleversé la recherche sur l'environnement. Ils ont, depuis plusieurs décennies, donné un élan considérable à la compréhension des phénomènes océanographiques de façon global en fournissant une couverture spatiale et temporelle inégalées. Dans cette étude, nous montrons comment nous avons procédé, étape par étape, pour calculer et cartographier un facteur clé, le flux de CO_2 (FCO_2) à l'interface air-mer, et ceci, afin de contribuer à l'observation de la réaction de l'océan austral (plus précisément dans le secteur au sud de l'Australie) vis-à-vis d'une augmentation manifeste du taux de dioxyde de carbone (CO_2) dans l'atmosphère. Les océans sont des puits de CO_2 qui permettent de réguler la concentration du CO_2 dans l'air (nous utiliserons le terme fugacité du CO_2 atmosphérique, $f\text{CO}_2^{\text{air}}$), ces derniers absorbent ce CO_2 en trop, ce qui fait augmenter sa concentration dans l'eau (nous utiliserons le terme fugacité du CO_2 dans l'eau, $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$). Cette augmentation n'est pas sans effet sur l'eau ; elle contribue au contraire à l'acidification du milieu marin menaçant par conséquent la bio-géo-chimie de l'eau et ainsi la vie marine en générale. Nous procéderons donc en commençant par déterminer les paramètres nécessaires pour le calcul de cet échange de CO_2 entre l'air et la surface de l'eau appelé flux de CO_2 , soit la température et la salinité à la surface de l'océan (SST et SSS respectivement), le $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$, le $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ et à la vitesse du vent environnant. Ainsi, la première contribution qui sera présentée portera sur l'estimation de la SSS en utilisant la SST satellitaire. En effet, ce paramètre reste encore aujourd'hui difficile à obtenir avec une bonne précision par satellite ; une véritable alternative est présentée afin d'obtenir, et donc de cartographier la SSS. Une deuxième expérience vient par la suite compléter le travail en présentant cette fois-ci une approche permettant d'avoir la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ par satellite en utilisant la SST et la Chlorophylle *a* (Chl*a*). Encore une fois, ceci a été suivi par la cartographie de ce paramètre estimé ainsi que l'analyse des résultats retenus. Ces deux paramètres estimés par satellite, et en combinaison avec les autres, ont donc été utilisés pour calculer le FCO_2 dans cette région de l'océan austral, dans la période s'étalant du printemps à l'été austral (d'octobre à mars). Tous les travaux réalisés, de l'importation à l'exploitation en passant par les pré-traitements, l'organisation des données et la modélisation, ont été développés sous forme de code source (en langage MatLab[®]) pour permettre une utilisation plus simple dans le futur, et ont donc permis la mise en œuvre de cartes du FCO_2 . L'analyse de ces résultats a montré que la région étudiée était dès les premières années un puits de CO_2 ($\sim -2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2002/2003) comme cela a été constaté dans d'autres régions de cet océan, mais qu'en plus, le taux d'absorption du CO_2 augmente au fil des années (jusqu'à $\sim -7 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2014/2015). Nous avons donc bien une réaction à l'augmentation du CO_2 anthropique dans l'atmosphérique (dû à l'exploitation et la production industrielle de produits émanant du CO_2). Nous avons aussi montré que cette augmentation du taux d'absorption touche toutes les latitudes, la région subantarctique et antarctique ; contribuant directement à l'acidification du milieu marin à la surface de l'océan.

ABSTRACT

The advent of satellites and the data collected by them has improved the environment research. Since several decades, they provided a significant boost to the understanding of global oceanographic phenomena by providing unmatched spatial and temporal coverage. In this study, we show how we proceed step by step, to calculate and map a key factor in the observation of the reaction of the Southern Ocean (specifically in the area south of Australia) against increase in carbon dioxide (CO_2) levels in the atmosphere. The oceans are CO_2 sinks which regulate the concentration of CO_2 in the air (called fugacity of atmospheric CO_2 , $f\text{CO}_2^{\text{air}}$), they absorb this extra CO_2 , increasing its concentration in water (called fugacity of seawater CO_2 , $f\text{CO}_2^{\text{sw}}$). This increase is not without effect on the water ; it contributes to the acidification of the marine environment thus threatening the bio-geo-chemistry of water and so the marine life in general. We therefore proceed by first determining the parameters required for the calculation of this CO_2 exchange between the air and the sea-surface water called CO_2 Flux (FCO_2), namely, the sea-surface temperature and salinity (SST and SSS respectively), the $f\text{CO}_2^{\text{sw}}$, the $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ and speed of the surrounding wind. The first contribution presented here will focus on estimating the SSS using satellite SST. In fact, this still remains difficult to obtain it with a good precision by satellite ; a real alternative is presented to obtain, and therefore map the SSS. A second experiment has subsequently completed our work ; we present an approach on how to estimate the $f\text{CO}_2^{\text{sw}}$ by satellite using the SST and Chlorophyll *a* (Chl*a*). Again, this was followed by the mapping of the estimated parameter and the analysis of the obtained results. These two parameters estimated by satellite, and in combination with the others, we therefore used them to calculate the FCO_2 in this region of the Southern Ocean in the period extending from spring to austral summer (October to March, from 2002/2003 to 2014/2015). All work carried out and import operations through preprocessing, the organization of data and modeling, were developed as a set source codes (in MatLab[®] language) to allow easier use in future, and thus provide FCO_2 maps. Analysis of these results showed that the studied area was, in the early years, a sink of CO_2 ($\sim -2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ in 2002/2003) as well as it has been observed in other regions of the Southern Ocean, but also that the CO_2 absorption rate increases over the years (up to $\sim -7 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2014/2015). These results show that there is a reaction to the increasing of anthropogenic CO_2 in the air (due to exploitation and industrial productions which reject CO_2). We also showed that this increasing in absorption rate affects all latitudes, the sub-Antarctic region as well as the Antarctic region ; directly contributing to the acidification of the marine environment of the sea-surface waters.

Table des matières

REMERCIEMENTS	ii
RÉSUMÉ	iii
ABSTRACT	iv
GLOSSAIRE	xx
INTRODUCTION GÉNÉRALE	xxii
1 GENERALITES	1
1.1 L’océan Austral	1
1.1.1 Région d’étude	4
1.2 Le système des carbonates et l’acidification des Océans	5
1.2.1 Le système des carbonates	5
1.2.2 L’acidification de l’eau de mer	7
1.2.3 Pression partielle ou fugacité du CO ₂ ?	9
1.2.4 Distribution des paramètre du CO ₂	10
1.3 Échanges océan-atmosphère	11
1.4 La télédétection	13
1.4.1 Bref historique de la télédétection	13
1.4.2 Principe général	15
1.4.3 Accessibilité aux données	18
2 DONNÉES ET MÉTHODES	20
2.1 Données <i>in situ</i>	20
2.1.1 Les sources de données	20
2.1.1.1 Le projet MINERVE	20
2.1.1.2 Le projet SURVOSTRAL	23
2.1.1.3 Le projet IMOS	24
2.1.1.4 La station CAPE GRIM	26
2.1.2 Analyse des données <i>in situ</i>	27
2.1.2.1 La température	29
2.1.2.2 La salinité	32
2.1.2.3 L’alcalinité totale	34
2.1.2.4 Le carbone inorganique dissous total	36

2.1.2.5	Le potentiel d'hydrogène	38
2.1.2.6	La fugacité du CO ₂ dans l'eau	40
2.1.2.7	La fugacité du CO ₂ dans l'air	42
2.1.2.8	La vitesse du vent	44
2.1.3	Format et mode de lecture :	47
2.2	Données Satellitaires	50
2.2.1	Les sources de données	50
2.2.1.1	MODIS	50
2.2.1.2	AQUARIUS	52
2.2.1.3	SMOS	52
2.2.1.4	ASCAT	53
2.2.1.5	QSCAT	53
2.2.2	Analyse des données <i>sat</i>	55
2.2.2.1	La Température	55
2.2.2.2	La Salinité	56
2.2.2.3	La Chlorophylle <i>a</i>	58
2.2.2.4	Vitesse du Vent	59
2.2.3	Format et mode de lecture	60
2.3	Méthodes utilisées	61
2.3.1	La régression linéaire simple (RLS)	62
2.3.2	La régression linéaire multiple (RLM)	64
2.3.3	Les réseaux de neurones (RN)	65
2.3.4	Implémentation des méthodes	68
2.3.4.1	La régression linéaire multiple	68
2.3.4.2	Feedforward Neural Network	69
2.4	Paramètres d'évaluation	71
3	CONTRIBUTION A L'ESTIMATION DE LA SALINITÉ	73
3.1	Première approche	74
3.2	Généralisation de la solution	82
3.2.1	Interpolation d'images <i>sat</i> par RLM	82
3.2.2	Interpolation d'images <i>sat</i> par FNN	82
3.3	Modèles et résultats finaux	84
4	CONTRIBUTION À L'ESTIMATION DE LA FUGACITE DU CO₂	88
4.1	Méthode Adoptée	89
4.2	Résultats de l'estimation de la fCO_2^{eau}	89
4.3	Cartographie de la fCO_2^{eau}	93
5	CONTRIBUTION A L'ESTIMATION DU FLUX DE CO₂	97
5.1	Méthode adoptée pour le calcul du FCO ₂	97
5.2	Vitesse du vent et coefficient de transfert	101
5.3	Calcul du FCO ₂	102
5.4	Analyse des résultats et discussion	104

6	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	110
6.1	Conclusion générale	110
6.2	Perspective en modélisation	112
6.2.1	Comparaison avec d'autres produits	112
6.2.2	Classification de la zone d'étude	112
6.2.3	RLM et RN	113
6.2.4	Utilisation d'autres Produits <i>sat</i>	113
6.3	Perspective en cartographie	113
6.3.1	Interpolation des images produites	113
6.3.2	Cartographie sur d'autres échelles de temps	115
	BIBLIOGRAPHIE	115
	ANNEXES	125
A	CONTRIBUTIONS SCIENTIFIQUES	126
A.1	Articles en auteur principal	126
A.1.1	Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean .	126
A.1.2	Satellite-derived CO ₂ flux in the surface seawater of the austral ocean south of Australia	135
A.2	Contribution à d'autres articles	153
A.2.1	A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data	153
A.2.2	Satellite-derived CO ₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic ocean using feedforward neural network	163
A.2.3	Climatological variations of total alkalinity and total inorganic carbon in the Mediterranean Sea surface waters	177
A.2.4	Evolution of the human impact on oceans	190
B	Équations des distributions latitudinales	192
B.1	Température	193
B.2	Salinité	194
B.3	Alcalinité Totale	195
B.4	Carbone Total	196
B.5	Potentiel d'Hydrogène	197
B.6	Fugacité Du CO ₂ dans l'Air	198
B.7	Fugacité Du CO ₂ Dans l'Eau	199
B.8	Vitesse Du Vent	200
C	Réseaux de neurones	201
C.1	Récapitulatif sur les réseaux de neurones	201
C.2	Paramètres d'apprentissage	202
C.3	Différents nombres de neurones dans la couche cachée	203

D Algorithmes et Codes	204
D.1 Complexité d'un algorithme	204
D.2 Interpolation d'une image <i>sat</i> par RLM	205
D.3 Création des numéros de jours pour chaque image sous 8 jours	206
D.4 Téléchargement automatique des données <i>sat</i>	207
D.5 Calcul du Flux	209
D.6 Équation à partir d'un FNN	211
E Modélisation de la salinité	212
E.1 Équations de salinité produites pour chaque rotation	212
E.2 Résultats détaillés pour l'estimation de la salinité	212
E.2.1 Généralisation de la solution, Image <i>sat</i> d'une journée	213
E.2.1.1 R0	213
E.2.1.2 R2	214
E.2.1.3 R4	214
E.2.2 Généralisation de la solution, Image <i>sat</i> d'une journée interpolées avec la RLM	215
E.2.2.1 R0	215
E.2.2.2 R2	216
E.2.2.3 R4	216
E.2.3 Généralisation de la solution, Image <i>sat</i> d'une journée interpolée avec les NNs	217
E.2.3.1 R0	217
E.2.3.2 R2	218
E.2.3.3 R4	218
E.2.4 Généralisation de la solution, Image <i>sat</i> composite sous 8 jours	219
E.2.4.1 R0	219
E.2.4.2 R2	220
E.2.4.3 R4	220
E.3 Cartes de salinité produites	222
F Modélisation de la fugacité du CO₂	235
F.1 Equations correspondantes aux FNNs de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ produits pour chaque rotation .	235
F.2 Cartes de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (μatm) produites	238
G Calcul du Flux de CO₂ (FCO₂)	251
G.1 Résultats du Calcul du Flux pour toutes les références	251
G.2 Régression du FCO ₂ ($\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) <i>in situ</i> et <i>sat</i>	252
G.3 Cartes du flux de CO ₂ ($\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) produites	255
G.4 Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO ₂ ($\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) suivant toutes les équations	268
G.5 Distribution latitudinaire du FCO ₂ ($\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) suivant toutes les équations	271
H Spécifications techniques	273

I	Copyrights et permissions d'utilisation	275
	Copyright figure 1.1	276
	Copyright figure 1.8	278
	Copyright figure 1.10	283

Table des figures

1	D'où vient le CO ₂ dans l'air ?	xxii
2	Évolution de la concentration de CO ₂ depuis l'aire industrielle	xxiii
3	Évolution du CO ₂ dans l'atmosphère depuis l'aire pré-industrielle	xxiii
1.1	Circulation générale des océans.	2
1.2	Courants entrainant la couche superficielle des eaux autour du continent Antarctique.	2
1.3	Courants marins de fond. (a) : Coupe verticale montrant les différentes couches et leurs interactions, (b) : Résumé de la circulation en surface et en profondeur mondiale entre les océans.	3
1.4	Région d'étude avec les différents zones et fronts.	5
1.5	Pourcentage des proportions des différentes formes de carbone dissous en fonction du pH.	7
1.6	Processus d'acidification de l'océan.	8
1.7	Recensement national des articles traitants de l'acidification des océans entre 2005 et 2014 pour les pays avec au moins cinq articles publiés.	9
1.8	Effets des différents processus chimiques sur la variation du C _T et de l'A _T	10
1.9	Principaux processus affectants la distribution des paramètres du CO ₂	11
1.10	Principales sources de données pour les satellites.	14
1.11	Scématisation d'une onde électromagnétique et ses polarisations.	15
1.12	Récapitulatif des ondes du spectre électromagnétique.	16
1.13	Représentation schématique des différents type d'interaction du rayonnement électromagnétique en haut et un exemple de signature spectrale en bas.	17
1.14	Exemple d'image satellite de concentration de Chlorophylle _a des océans (été 2014) produit par le satellite MODIS.	19
2.1	Distribution quantitative des données MINERVE.	22
2.2	Distribution temporelle des données MINERVE.	22
2.3	Distribution quantitative des données SURVOSTRAL.	23
2.4	Distribution temporelle des données SURVOSTRAL.	24
2.5	Distribution quantitative des données IMOS.	25
2.6	Distribution temporelle des données IMOS.	25
2.7	Données de pression partielle du CO ₂ collectées par la station Cape Grim	27
2.8	Trajets de L'Astrolabe entre 2002/2003 et 2014/2015 pour les trois rotation R0, R2 et R4.	28
2.9	Distribution latitudinale de la température <i>in situ</i>	29

2.10	Variabilité interannuelle de la température pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	31
2.11	Distribution latitudinale de la Salinité <i>in situ</i>	32
2.12	Variabilité interannuelle de la salinité pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	33
2.13	Distribution latitudinale de l' A_T <i>in situ</i>	34
2.14	Variabilité interannuelle de l' A_T pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	35
2.15	Distribution latitudinale du C_T <i>in situ</i>	36
2.16	Variabilité interannuelle du C_T pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	37
2.17	Distribution latitudinale du pH <i>in situ</i>	38
2.18	Variabilité interannuelle du pH pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	39
2.19	Distribution latitudinale de la fCO_2^{eau} <i>in situ</i>	40
2.20	Variabilité interannuelle de la fCO_2^{eau} pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	41
2.21	Distribution latitudinale de la fCO_2^{air} <i>in situ</i>	42
2.22	Variabilité interannuelle de la fCO_2^{air} pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).	43
2.23	Distribution latitudinale de la vitesse du vent <i>in situ</i>	44
2.24	Variabilité interannuelle de la vitesse du vent pour chaque rotation et pour une la période complète (R0+R2+R4).	45
2.25	Données récoltées lors de la campagne R4 en 2014/2015.	46
2.26	Exemple d'image de moyenne annuelle des paramètres satellitaires.	54
2.27	Distribution moyenne de la température donnée par les images satellitaires de MODIS _{Aqua}	55
2.28	Distribution moyenne de la salinité donnée par les images satellitaires de SMOS.	57
2.29	Distribution moyenne de la salinité donnée par les images satellitaires d'AQUARIUS.	57
2.30	Distribution moyenne de la chlorophylle _a donnée par les images satellitaires de MODIS _{Aqua}	58
2.31	Distribution moyenne de la vitesse du vent donnée par les images <i>sat</i> des deux satellites QSCAT et ASCAT.	59
2.32	Exemple d'une régression linéaire simple.	62
2.33	Exemple d'une régression linéaire multiple.	64
2.34	Schéma fonctionnel d'un neurone artificiel.	65
2.35	Schéma d'un Perceptron Multi-Couches (à trois couches).	67
3.1	Relation entre la température et la salinité pour les trois rotations.	75
3.2	Modèle d'estimation de la salinité par la température et la latitude obtenue en appliquant une RLM avec MATLAB [®]	77
3.3	Distribution latitudinale des erreurs pour la modélisation de la salinité en R0.	78
3.4	Distribution latitudinale des erreurs pour la modélisation de la salinité en R0 (Après élimination des outliers et correction du biais).	79
3.5	Exemple de comparaison de la salinité estimée en utilisant la SST _{MODIS_a} avec les données de SMOS et AQUARIUS.	81

3.6	Exemples d'interpolation d'images <i>sat</i> de température en utilisant la RLM et les RNs.	83
3.7	Exemple d'image <i>sat</i> de température pour les quatre types utilisés dans la généralisation de l'estimation de la salinité.	86
4.1	Schéma de l'algorithme suivi pour le choix du meilleur FNN pour chaque rotation.	89
4.2	Résultats de la validation et du test des FNN pour l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$	90
4.3	Régression de l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ pour les meilleurs réseaux de neurones des trois rotations.	92
4.4	Exemples d'estimation et de la distribution de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ à différentes périodes de l'été austral 2012/2013.	94
4.5	Distribution de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ entre 2002 et 2013 dans l'été austral (en utilisant la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ estimée par les FNN).	95
5.1	Algorithme général adopté pour le calcul du FCO_2 en utilisant les données <i>in situ</i> et <i>sat</i> (brutes ou modélisées).	98
5.2	Variabilité du coefficient de transfert k par rapport à la vitesse du vent.	101
5.3	Histogramme de la vitesse du vent <i>in situ</i> issue de la base de données IMOS.	102
5.4	Régression entre les deux calculs du FCO_2 (<i>in situ</i> et <i>sat</i> exprimées en $\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) pour l'équation de Wanninkhof (2014).	103
5.5	Exemples d'estimation et de cartographie de la FCO_2 à différentes périodes de l'été australe 2014/2015.	104
5.6	Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO_2 suivant l'équation de Wanninkhof (2014).	105
5.7	Variabilité inter-annuelle et anomalies des paramètres utilisés pour le calcul du FCO_2	106
5.8	Variabilité saisonnière du FCO_2 suivant l'équation de Wanninkhof (2014).	107
5.9	Variabilité latitudinale de la distribution du FCO_2 en utilisant l'équation de Wanninkhof (2014).	108
6.1	Exemple de classification de la région d'étude en trois classes.	112
6.2	Interpolation d'une image de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ en utilisant la méthode DIVA.	114
6.3	Exemple d'application des modèles développés sur des images mensuelles (Janvier 2005).	115
C.1	Exemple de modélisation avec un FNN en utilisant différents nombres de neurones dans la couche cachée, pour l'interpolation d'une image <i>sat</i> de température.	203
E.1	Evolution de la salinité entre Octobre 2002 et Mars 2003	222
E.2	Evolution de la salinité entre Octobre 2003 et Mars 2004	223
E.3	Evolution de la salinité entre Octobre 2004 et Mars 2005	224
E.4	Evolution de la salinité entre Octobre 2005 et Mars 2006	225
E.5	Evolution de la salinité entre Octobre 2006 et Mars 2007	226
E.6	Evolution de la salinité entre Octobre 2007 et Mars 2008	227
E.7	Evolution de la salinité entre Octobre 2008 et Mars 2009	228
E.8	Evolution de la salinité entre Octobre 2009 et Mars 2010	229
E.9	Evolution de la salinité entre Octobre 2010 et Mars 2011	230

E.10	Evolution de la salinité entre Octobre 2011 et Mars 2012	231
E.11	Evolution de la salinité entre Octobre 2012 et Mars 2013	232
E.12	Evolution de la salinité entre Octobre 2013 et Mars 2014	233
E.13	Evolution de la salinité entre Octobre 2014 et Mars 2015	234
F.1	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2002 et Mars 2003	238
F.2	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2003 et Mars 2004	239
F.3	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2004 et Mars 2005	240
F.4	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2005 et Mars 2006	241
F.5	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2006 et Mars 2007	242
F.6	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2007 et Mars 2008	243
F.7	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2008 et Mars 2009	244
F.8	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2009 et Mars 2010	245
F.9	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2010 et Mars 2011	246
F.10	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2011 et Mars 2012	247
F.11	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2012 et Mars 2013	248
F.12	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2013 et Mars 2014	249
F.13	Evolution de la fugacité du CO ₂ entre Octobre 2014 et Mars 2015	250
G.1	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Liss et Merlivat (1986).	252
G.2	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Wanninkhof (1992).	252
G.3	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Wanninkhof et McGillis (1999).	252
G.4	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Nightingale <i>et al.</i> (2000).	252
G.5	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Jean-Baptiste <i>et al.</i> (2002).	253
G.6	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Ho <i>et al.</i> (2006).	253
G.7	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Sweeney <i>et al.</i> (2007).	253
G.8	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Wanninkhof <i>et al.</i> (2009).	253
G.9	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Ho <i>et al.</i> (2011) (équation (a)).	254
G.10	Regression entre les deux calculs du FCO ₂ (<i>in situ</i> et <i>sat</i>) pour l'équation de Ho <i>et al.</i> (2011) (équation (b)).	254
G.11	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2002 et Mars 2003	255
G.12	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2003 et Mars 2004	256
G.13	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2004 et Mars 2005	257
G.14	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2005 et Mars 2006	258
G.15	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2006 et Mars 2007	259
G.16	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2007 et Mars 2008	260
G.17	Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2008 et Mars 2009	261

G.18 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2009 et Mars 2010	262
G.19 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2010 et Mars 2011	263
G.20 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2011 et Mars 2012	264
G.21 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2012 et Mars 2013	265
G.22 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2013 et Mars 2014	266
G.23 Evolution du flux de CO ₂ entre Octobre 2014 et Mars 2015	267
G.24 Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO ₂ suivant les équations 1 à 4 du k	268
G.25 Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO ₂ suivant les équations 5 à 8 du k	269
G.26 Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO ₂ suivant les équations 9 à 11 du k	270
G.27 Distribution latitudinaire du FCO ₂ suivant toutes les équations 1 à 3.	271
G.28 Distribution latitudinaire du FCO ₂ suivant toutes les équations 4 à 6.	271
G.29 Distribution latitudinaire du FCO ₂ suivant toutes les équations 7 à 9.	272
G.30 Distribution latitudinaire du FCO ₂ suivant toutes les équations 10 à 11.	272
H.1 Spécifications techniques du matériel et du logiciel utilisés.	274

Liste des tableaux

1.1	Liste des formules pour le calcul du coefficient de transfert k , u est la vitesse du vent et Sc le nombre de Schmidt	12
2.1	Récapitulatif des données disponibles pour la mission MINERVE	22
2.2	Récapitulatif des données disponibles pour le projet IMOS	25
2.3	Liste des fonctions d'activation les plus utilisées	66
3.1	Partitionnement de la base de données pour la création, la validation et le test du modèle de salinité pour R0.	76
3.2	Résultats de la modélisation de la salinité pour R0.	78
3.3	Résultats de la modélisation de la salinité pour R0 (après élimination des outliers et correction du biais).	79
3.4	Comparaison entre la salinité estimée par SST _{MODIS_a} (SSS estimée) avec les deux produits de salinité <i>sat</i> (SMOS et AQUARIUS).	81
3.5	Nombre de points pour la création et la validation des nouveaux modèles d'estimation de la salinité après division de la base de données SURVOSTRAL (données de SSS corrigées).	84
3.6	Résultats de la génération de l'estimation de la salinité en utilisant différents types d'images.	85
3.7	Comparaison de la SSS estimée et la SSS produite par les deux satellites SMOS et AQUARIUS par rapport à la SSS <i>in situ</i>	87
4.1	Récapitulatif des résultats pour les meilleurs réseaux de neurones lors de l'estimation de la fCO_2^{eau}	91
4.2	Résultats de la validation <i>in situ</i> des modèles de fCO_2^{eau} en utilisant la base de données MINERVE_2.	93
5.1	Résultats du calcul du flux en utilisant l'équation de Wanninkhof (2014) : le RMSE ($mmol\ CO_2.m^{-2}.j^{-1}$) est calculé suivant la différence entre le calcul du FCO_2 avec les données <i>in situ</i> et <i>sat</i> , le R est le coefficient de corrélation de la régression entre le FCO_2 calculé avec les données <i>in situ</i> et <i>sat</i> , Glob. : Global.	102
C.1	Récapitulatif sur l'apprentissage <i>Supervisé</i> avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.	201
C.2	Récapitulatif sur l'apprentissage <i>Non-Supervisé</i> avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.	202

C.3	Récapitulatif sur l'apprentissage <i>Hybride</i> avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.	202
D.1	Liste des fonctions d'activation les plus utilisées	204
E.1	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	213
E.2	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	213
E.3	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	214
E.4	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	214
E.5	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	214
E.6	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	215
E.7	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par RLM ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	215
E.8	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	215
E.9	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	216
E.10	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	216
E.11	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	216
E.12	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	217

E.13	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	217
E.14	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	217
E.15	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	218
E.16	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	218
E.17	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	218
E.18	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	219
E.19	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	219
E.20	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images <i>sat</i> composite sous 8 jours ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	219
E.21	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	220
E.22	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images <i>sat</i> composite sous 8 jours ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	220
E.23	Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> d'une journée ; création du modèle et validation avec les données <i>sat</i> correspondant aux données <i>in situ</i> utilisées dans la création du modèle.	220
E.24	Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images <i>sat</i> composite sous 8 jours ; test avec les données <i>in situ</i> de la partie test de la base de données et test avec les données <i>sat</i> correspondant à ces données <i>in situ</i>	221

G.1	Résultats du calcul du Flux pour toutes les équations. Le RMSE ($\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$) est calculé suivant la différence entre le calcul du FCO_2 avec les données <i>in situ</i> et <i>sat</i> , le R^2 est le coefficient de détermination de la régression entre le FCO_2 calculé avec les données <i>in situ</i> et <i>sat</i> , Glob. : Global.	251
-----	---	-----

Table des codes sources

2.1	Exemple d'importation des données MINERVE.	47
2.2	Mise en forme et sauvegarde des données MINERVE par année et par numéro de jour.	48
2.3	Exemple d'importation des données IMOS.	49
2.4	Exemple de lecture de fichier <i>sat</i> de température MODIS _{Aqua}	60
2.5	Exemple de lecture de fichier <i>sat</i> de vitesse du vent QUICKSAT.	61
2.6	Exemple d'une fonction pour l'application d'une régression linéaire multiple en utilisant la méthode des moindres carrés ; estimation de la salinité en utilisant la latitude et la température.	69
2.7	Exemple d'application d'une régression non-linéaire en utilisant un RN de type FNN avec la méthode d' <i>appr</i> LMA pour l'interpolation de points manquants d'une image satellite.	70
5.1	Fonction utilisée pour le calcul du flux de CO ₂ (FCO ₂) à l'interface air-mer. . . .	100
D.1	Interpolation d'une image <i>sat</i> de SST _{MODIS_a} par RLM.	205
D.2	Création des numéros de jours dans l'année pour chaque tranche de 8 jours. . . .	206
D.3	Exemple de téléchargement des données <i>sat</i> d'un jour de MODIS _{Aqua}	207
D.4	Exemple de téléchargement des données <i>sat</i> de 8 jours de MODIS _{Aqua}	207
D.5	Exemple de téléchargement des données <i>sat</i> d'ASCAT.	208
D.6	Calcul du flux en utilisant les données <i>sat</i>	210
D.7	Création d'une équation à partir d'un FNN.	211

GLOSSAIRE

Abréviation	Description
<i>appr</i>	Apprentissage (Pour les réseaux de neurones)
AQUARIUS	Nom du satellite de la mission du même nom
AR	Antarctic Region
ASCAT	Advanced Scatterometer
CAZ	Continental Antarctic Zone
IMOS	Integrated Marine Observing System
<i>in situ</i>	Référence aux données récoltées en mer
<i>lat</i>	Latitudes
<i>lon</i>	Longitudes
MIE	Maximum Ice Extension
MINERVE	Mesures à l'INterface Eau-aiR de la Variabilité des Échanges de CO ₂
MODIS	Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer
MODIS _{Aqua}	Référence à la partie "eau" du satellite MODIS
PF	Polar Front
PFZ	Polar Front Zone
POOZ	Polar Open Ocean Zone
QSCAT	Quik Scatterometer
SACCF	Sub-Antarctic Circumpolar Current Front
SAF	Sub-Antarctic Front
SAR	Sub-Antarctic Region
SAT	Référence aux données satellitaires
SAZ	Sub-Antarctic Zone
SFZ	Seasonally Frozen Zone
SMOS	Soil Moisture and Ocean Salinity
SSS _{AQUARIUS}	Salinité donnée par AQUARIUS
SSS _{SMOS}	Salinité données par SMOS
SST _{MODIS_a}	Température donnée par MODIS _{Aqua}
STF	Sub-Tropical Front
STZ	Sub-Tropical Zone
SURVOSTRAL	SURVeillance de l'Océan AuSTRAL

Abréviation	Description	unité
A_T	Alcalinité Totale	$\mu\text{mol.kg}^{-1}$
$Chla$	La Chlorophylle _a	mg Chla.m^{-3}
CO_2	Dioxyde de Carbone	<i>ppmv</i>
C_T	Carbone Total	$\mu\text{mol.kg}^{-1}$
$f\text{CO}_2$	fugacité du CO_2	μatm
$f\text{CO}_2^{\text{eau}}$	fugacité du CO_2 dans la couche de surface de l'eau	μatm
$f\text{CO}_2^{\text{air}}$	fugacité du CO_2 dans la couche d'air au contact de l'eau	μatm
FCO_2	Le flux de CO_2 à l'interface air-mer	$\text{mmol CO}_2.\text{m}^{-2}.\text{j}^{-1}$
$p\text{CO}_2$	Pression partielle du CO_2	μatm
$p\text{H}$	Potentiel d'hydrogène	
SST	La Température à la surface de l'eau	$^{\circ}\text{C}$
SSS	La salinité à la surface de l'eau	
VV	La Vitesse du vent	Noeud (nd) ou m.s^{-1}
$\Delta f\text{CO}_2$	différence de fugacité entre $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et $f\text{CO}_2^{\text{air}}$	μatm

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le changement climatique représente la thématique globale du présent travail, plus précisément, la réponse des océans vis à vis des processus d'absorption et de rejet du dioxyde de carbone (CO₂) à l'interface air-mer. Le CO₂ est une molécule que l'on trouve en abondance dans notre écosystème, elle est utilisée par les végétaux terrestres et océaniques pendant la photosynthèse ; la molécule est ainsi transformée en carbone organique incorporé à leur matière vivante (Breviere, 2005). À contrario, la production d'énergie pour le développement de l'activité humaine produit du CO₂ qui est rejeté dans l'air. Le Global Carbon Atlas (<http://www.globalcarbonatlas.org/>) propose la figure 1 afin de comprendre les sources de ce CO₂ rejeté dans l'atmosphère ainsi que les continents et pays qui y contribuent.

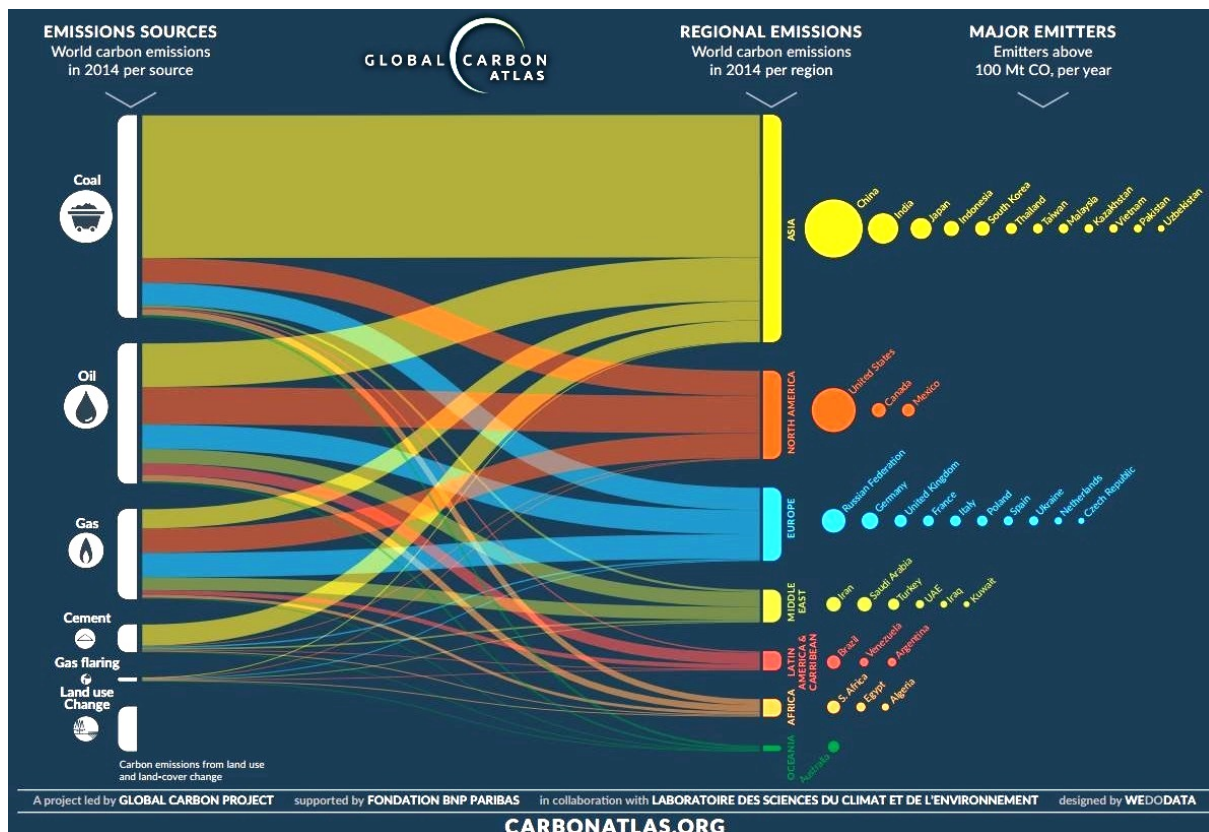


FIGURE 1 – D'où vient le CO₂ dans l'air ? (<http://www.globalcarbonatlas.org/>)

C'est sans aucune surprise que l'on remarque que les produits d'énergies fossiles sont en tête ; avec en première position le charbon suivi du pétrole et du gaz. Géographiquement, c'est l'Asie et à sa tête la Chine qui est le plus grand émetteur de CO₂ suivi des États-Unis d'Amérique. Grâce aux recherches menées sur les carottes glaciaires puis par des stations de mesures, nous pouvons dire au jour d'aujourd'hui que la concentration en CO₂ dans l'air est la plus élevée depuis les 800000 dernières années¹, Nous avons même dépassé la barre symbolique des 400 ppm (partie par million) en 2014 (Figure 2 et 3).

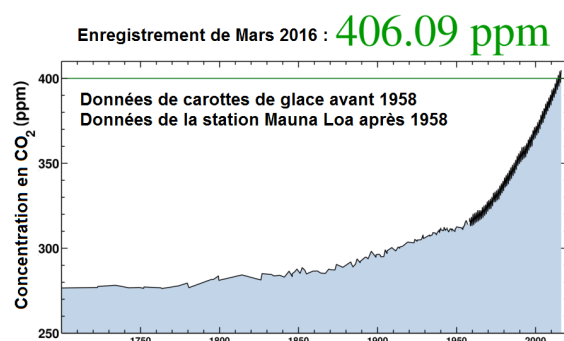


FIGURE 2 – Évolution de la concentration de CO₂ depuis l'ère industrielle (Dlugokencky et Tans, 2016).



FIGURE 3 – Évolution du CO₂ dans l'atmosphère depuis l'ère pré-industrielle (<http://www.globalcarbonatlas.org/>).

Cette modification de la composition chimique de l'atmosphère correspond à un effet de serre additionnel à l'origine de fluctuations climatiques ; en effet, dès le début des années 2000, on imputait à plus de 50 % le réchauffement global de la terre à cette augmentation de CO₂ (Sarmiento et Gruber, 2002). C'est dans ce contexte de crise climatique que tous les chercheurs du monde tire la sonnette d'alarme pour éveiller les consciences et prédire les risques présents et futurs.

Les Océans, qui couvrent plus de 71 % du globe, jouent un rôle primordial dans le ralentissement de l'augmentation de la concentration du CO₂ dans l'air. Les eaux du monde, en absorbant le CO₂, représente un réservoir 60 fois plus important que l'atmosphère dans la séquestration du CO₂ (Sabine *et al.*, 2004). L'enjeu majeur de la recherche sur l'absorption du CO₂ par les

1. Les graphiques produits par le *Global Carbon Atlas* sont réalisés en utilisant les sources suivantes : (1) *Carbon dioxide Information Analysis Center* (Boden, T.A. *et al.*, 2015) http://cdiac.ornl.gov/trends/emis/meth_reg.html. (2) : *National Inventory Submissions 2014, United Nations Framework Convention on Climate Change* http://unfccc.int/national_reports/annex_i_ghg_inventories/national_inventories_submissions/items/8108.php, Mai 2015. (3) : *Statistical Review of World Energy, BP* <http://www.bp.com/en/global/corporate/about-bp/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html>

océans est de quantifier en premier lieu ce processus, et par la suite, de déterminer l'effet de cette augmentation dans l'eau sur les organismes vivants mais aussi à quel point chaque océan peut encore accumuler ce CO₂ en trop, on parle alors d'échange air-mer ou "flux". Ainsi, ces trois années de thèse ont été consacrées à la contribution que nous pouvons apporter à la modélisation et l'estimation des paramètres océanographiques nécessaires au calcul de ce flux.

Comme beaucoup de travaux récents, cette thèse s'inscrit dans un cadre de pluridisciplinarité où l'on cherche à utiliser les avantages d'un domaine pour trouver des solutions à des problèmes d'un autre domaine ; encore plus lorsqu'il s'agit de l'informatique appliquée qui, devient aujourd'hui un outil nécessaire au développement de tous les domaines de recherche.

L'avantage majeur apporté par la programmation informatique dans cette thèse est l'automatisation des tâches à accomplir pour estimer le flux dans l'océan austral. Ainsi, chaque étape, chaque expérience ou même encore, chaque illustration reçoit un code spécifique et cela pour former un ensemble d'outils pour l'utilisateur. Ce travail a été réalisé afin de permettre aux utilisateurs futurs une simplicité et une rapidité d'utilisation et d'application, qu'il soit sur la même région étudiée ou bien sur d'autres régions de l'océan austral avec d'autres données. Nous essayons, dans la limite de la disponibilité des données *in situ* et satellitaires (*sat*), d'apporter une solution globale qui permet d'un côté, de modéliser des paramètres océanographiques, et de l'autre, l'application sur des images satellitaires afin de cartographier et d'étudier le résultat de façon globale.

Le titre de ce manuscrit a été choisi de façon à englober toutes les facettes de cette thèse. Nous avons en outre : "l'analyse d'images satellitaires" qui pose bien le sujet et montre l'utilisation de ce type de données en analysant ce qu'elles peuvent apporter à notre solution, nous avons aussi "développement d'outils informatiques" qui montre que tout a été mis en place en faisant appel à la programmation informatique, nous parlons aussi de "modéliser le transfert de CO₂ à l'interface air-mer" et ceci pour englober tout ce qui a été modélisé et estimé pour arriver à cette fin, et finalement nous rajoutons "les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien)" pour déterminer la zone sur laquelle nous avons appliqué nos expérimentations.

Les chapitres de ce manuscrit seront présentés comme suit :

- Le premier chapitre présentera le contexte général dans lequel s'inscrit cette thèse en présentant les aspects océanographiques, les caractéristiques générales de la région d'étude ainsi qu'une introduction dans le domaine de la télédétection.
- Le deuxième chapitre présentera toutes les données *in situ* et *sat* utilisées ainsi que la description des méthodes employées pour la modélisation des paramètres océanographiques.
- Dans le troisième chapitre, nous entamerons la partie pratique en commençant par notre contribution à l'estimation de la salinité de surface par des données *sat*.
- Le quatrième chapitre présentera notre contribution à l'estimation de la fugacité du CO₂ à la surface de l'eau en utilisant une nouvelle fois les données *sat*.
- Dans le cinquième chapitre, tous les paramètres *in situ*, *sat* ainsi que les modèles développés dans les chapitres précédents seront pris en considération afin de procéder au calcul du flux de CO₂ à l'interface air-mer, et ainsi analyser les résultats obtenus.

- Dans le sixième chapitre, nous conclurons notre travail en mettant en avant tout les résultats obtenus en les discutant. Des perspectives à ce travail seront aussi proposées.
- Dans un dernier chapitre, nous présenterons toutes les contributions scientifiques auxquelles j'ai participé.
- Les Annexes en fin de manuscrit viendront de temps à autre apporter plus de détails sur telle ou telle information donnée. Ils contiendront aussi des récapitulatifs de la cartographie de tous les paramètres estimés.

Chapitre 1

GENERALITES

Cette première partie de la thèse nous donne une présentation générale de l’océan austral et plus précisément la région de l’étude, mais nous permet aussi de mieux comprendre le fonctionnement du cycle du carbone et son implication dans l’acidification de l’océan. Nous présenterons aussi les notions de base sur la télédétection dans le domaine océanographique.

1.1 L’océan Austral

L’océan austral est le seul océan du monde à entourer un continent complet, l’Antarctique. Le socle rocheux de ce dernier est plus ou moins centré sur le Pôle Sud et quasi-recouvert de glace. La superficie de l’Antarctique est d’environ 14 millions de km². En hiver, l’expansion de la calotte glaciaire double la superficie, et de ce fait, la limite sud de l’océan austral fluctue d’une saison à une autre et d’une année à une autre.

L’océan austral représente aussi le lien entre les trois grands océans, l’Atlantique, le Pacifique et l’Indien. Il couvre 21% des eaux mondiales avec une extension latitudinale d’environ 30°S (de $\sim 30^\circ\text{S}$ à $\sim 60^\circ\text{S}$, Breviere (2005)). Cette singularité lui confère une place importante dans le système climatique ainsi que dans la circulation marine mondiale, et l’absence d’obstacles continentaux y contribue pour beaucoup. Des échanges importants sont alors constatés de part cette connexion avec les trois grands bassins ; les plus connues sont les échanges de chaleur, de sel et de carbone anthropique (Laika, 2008). La figure 1.1 présente l’océan austral dans le monde, ses connexions avec les autres masses d’eau ainsi que les courants marins agissant en permanence dans ses eaux.

Le principal facteur influant sur la circulation des eaux de surface est le vent, et cette région du monde détient le plus grand courant océanique. La figure 1.2 présente les courants de la couche superficielle, on dénote le courant *polaire* d’Est en Ouest et le courant *circumpolaire antarctique* appelé aussi *péri-antarctique* qui lui va d’Ouest en Est. Ces derniers sont limités par deux fronts : le front polaire antarctique qui ondule entre 50°S et 60°S de latitude et qui correspond à la limite supérieur de l’océan austral (*Convergence Antarctique*¹), et le deuxième à l’approche des côtes antarctiques nommé la *divergence antarctique*.

1. Zone de contraste thermique des eaux de surface de l’océan Austral ceinturant le continent Antarctique

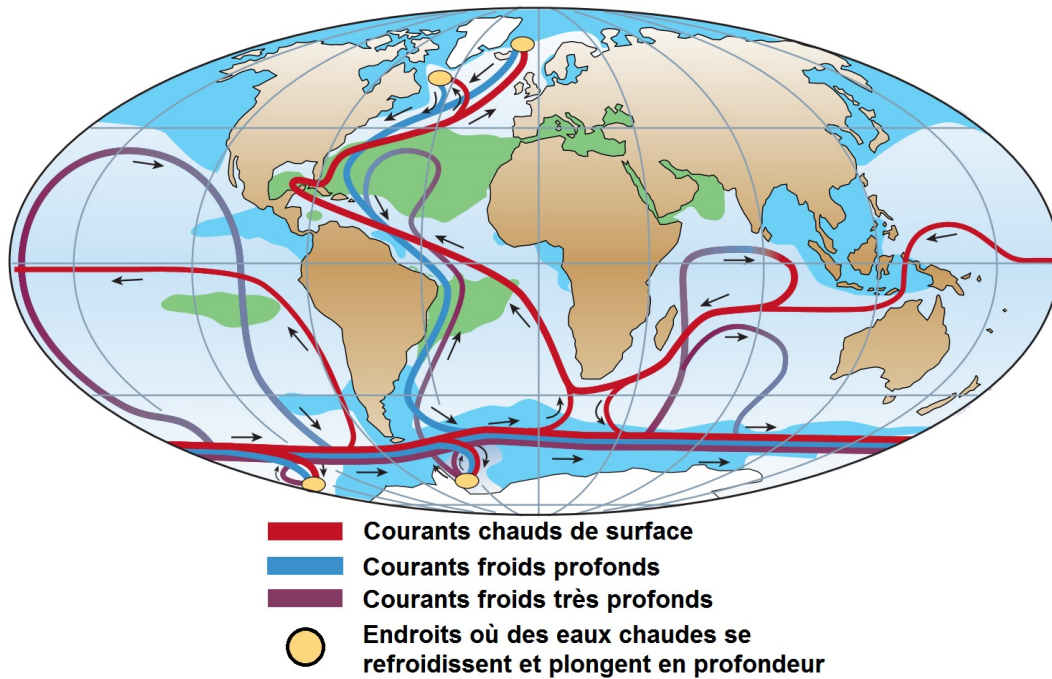


FIGURE 1.1 – Circulation générale des océans (Rahmstorf, 2002).

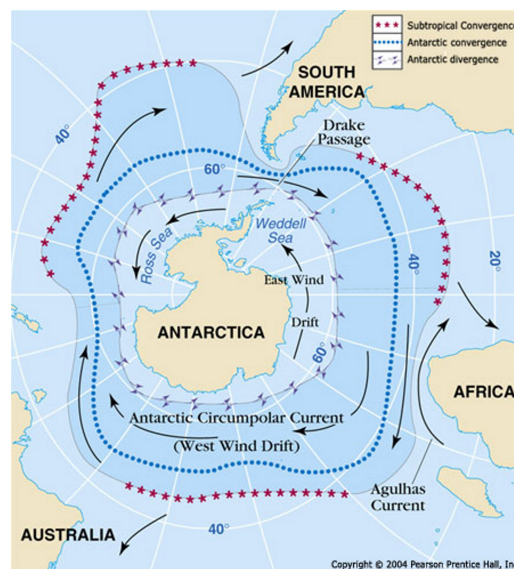


FIGURE 1.2 – Courants entraînant la couche superficielle des eaux autour du continent Antarctique (Antarctica's Ocean Circulation, <http://polardiscovery.who.edu/antarctica/circulation-en.html>).

Les courants dans la couche intermédiaire et profonde sont causés essentiellement par les propriétés physicochimiques des différentes masses d'eau (Figure 1.3). La stratification² verticale observée dans l'océan est fonction de la température, de la salinité et de la pression qui agissent sur la densité de l'eau de mer. La formation de la glace de mer pendant l'hiver est à l'origine de la formation de masses d'eau profonde antarctique (Antarctic Bottom Water, AABW, figure 1.3), plus spécialement, c'est l'une des régions principales de ventilation³ de l'océan intermédiaire et profond, puis l'export de ces masses d'eaux vers l'ensemble des océans (Chaigneau et Morrow, 2002; Broecker *et al.*, 1998; Rintoul, 2008).

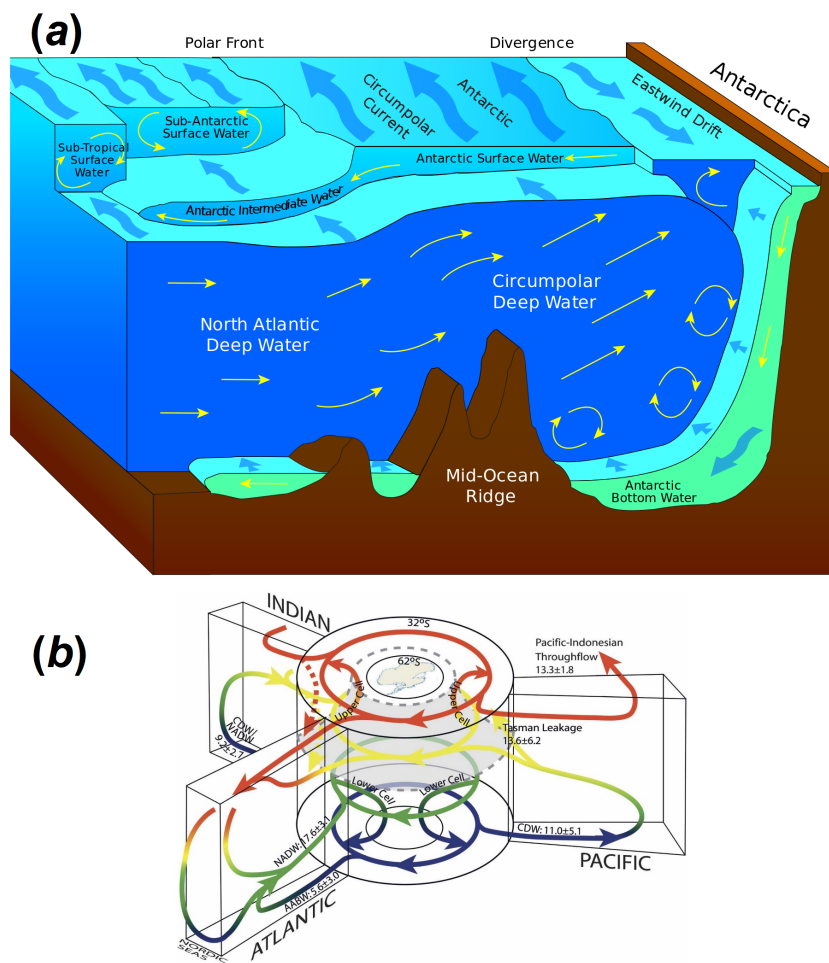


FIGURE 1.3 – Courant marin de fond. (a) : Coupe verticale montrant les différentes couches et leurs interactions par Oyster (2014), (b) : Résumé de la circulation en surface et en profondeur mondiale entre les océans (Figure 4 dans Lumpkin et Speer (2007)).

2. La stratification est la disposition en couches superposées
 3. La ventilation est un mécanisme de renouvellement par la dynamique océanique au contact d'une masse d'eau avec l'atmosphère puis sa plongée dans les profondeurs.

1.1.1 Région d'étude

Cette thèse se concentre sur l'étude d'une région spécifique de l'océan Austral qui se trouve au sud de l'Australie (Figure 1.4). Cette région est au carrefour des eaux de l'océan mondial; elle constitue la voie d'intercommunication entre les différents bassins océaniques en connectant des régions du globe très éloignées via les courants marins (L'océan Austral, Océans et climat, <https://www2.cnrs.fr>).

Les courants, la salinité, la température et la densité de l'eau définissent en général les positions des principaux fronts. Dans cette région, on étudie depuis longtemps la dynamique régissant ces eaux (Deacon, 1982; Orsi *et al.*, 1995; Belkin et Gordon, 1996; Park et Gambéroni, 1995; Rintoul *et al.*, 1997; Chaigneau et Morrow, 2002; Sokolov et Rintoul, 2002). La figure 1.4 présente les fronts que nous avons choisis pour notre étude, ces fronts sont à peu de chose près les mêmes pour les références citées précédemment. Nous avons en outre :

- Le front subtropical (STF pour Sub-Tropical Front) se situe habituellement vers 47,5°S.
- Le front Sub-antarctique (SAF pour Sub-Antarctic Front) vers 51,5°S.
- Le front polaire (PF pour Polar Front) vers 54,5°S.
- La limite maximale d'extension de glace (MIE pour Maximum Ice Extension) vers 60,5°S
- La frontière sud du Courant Circumpolaire Antarctique (SACCF pour Sub-Antarctic Circumpolar Current Front) vers 65.0°S.

Du nord au sud, six zones sont alors déterminées, Les trois premières zones constituent la région Sub-antarctique (SAR) située au sud de 43.0°S jusqu'à la frontière sub-antarctique (47,5°S) :

1. La zone subtropicale (STZ pour Sub-Tropical Zone) au nord du front STF à 47,5°S.
2. La zone sub-antarctique (SAZ pour Sub-Antarctic Zone) entre les fronts STF à 47,5°S et le SAF à 51,5°S
3. La zone polaire frontale (PFZ pour Polar Front Zone) entre SAF et PF.

Puis trois autres zones qui déterminent la Région antarctique (AR) qu'on appelle aussi Océan Antarctique :

4. la zone en permanence libre de glace (POOZ pour Polar Open Ocean Zone) située entre le PF à 54,5°S et la MIE à 60,5°S.
5. la zone saisonnièrement prise dans la glace de mer (SFZ pour Seasonally Frozen Zone) située entre la limite MIE et la SACCF à 65°S.
6. la zone au contact du continent antarctique (CAZ pour Continental Antarctic Zone) située au sud de 65°S entre la SACCF et le continent antarctique.

Nous verrons dans le chapitre suivant ce qui caractérise chaque zone en terme de propriétés physicochimiques.

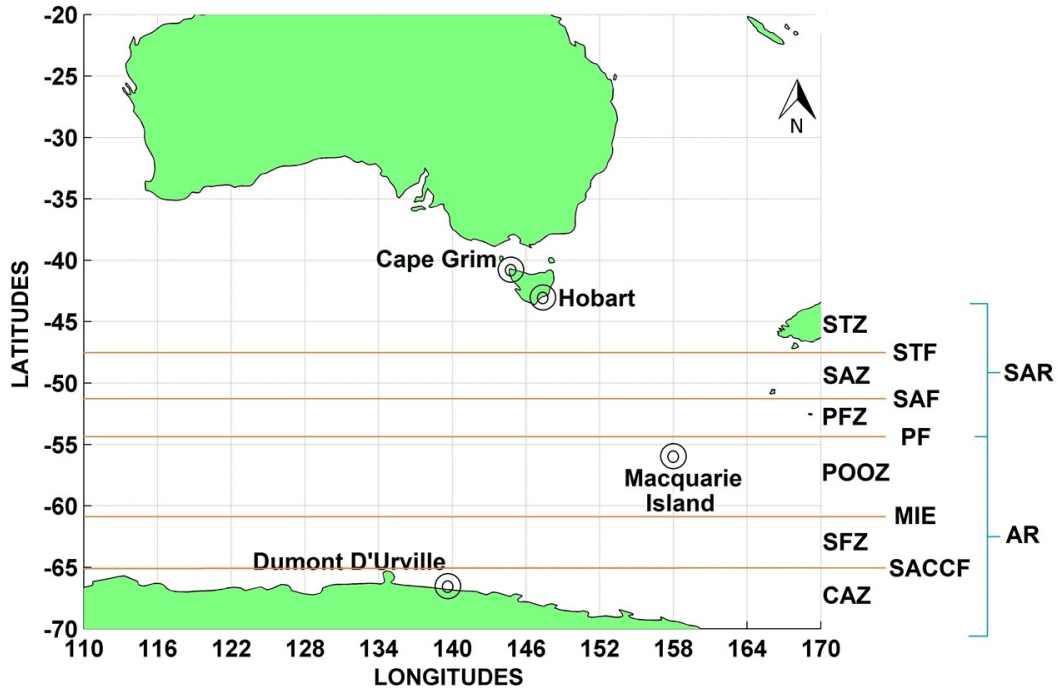


FIGURE 1.4 – Région d'étude avec les différents zones et fronts. Les régions : SAR pour Sub-Antarctic Region, AR pour Antarctic Region. Les zones : STZ : Sub-Tropical Zone, SAZ : Sub-Antarctic Zone, PFZ : Polar Front Zone, POOZ : Polar Open Ocean Zone, SFZ : Seasonally Frozen Zone, CAZ : pour Continental Antarctic Zone. Les fronts : STF : Sub-Tropical Front, SAF : Sub-Antarctic Front, PF : Polar Front, MIE : Maximum Ice Extension, SACCF : Sub-Antarctic Circumpolar Current Front.

1.2 Le système des carbonates et l'acidification des Océans

Le rôle de l'océan dans la régulation du climat et la mitigation⁴ du réchauffement global sont reconnus depuis longtemps (Monaco, 2014). En effet, il absorbe environ 2 Gt C an^{-1} (Wanninkhof *et al.*, 2013), soit entre 25% et 30% de CO_2 anthropique depuis la révolution industrielle (Sabine *et al.*, 2004; Sarmiento *et al.*, 2010; Intergovernmental Panel on Climate Change, 2014). Si les émissions futures de CO_2 anthropique continuent avec la même intensité qu'aujourd'hui, la concentration de CO_2 pourrait atteindre les 788 ppmv ⁵ en 2100 selon Gattuso et Hansson (2011).

1.2.1 Le système des carbonates

Le CO_2 dans l'atmosphère (CO_{2g}) est stable⁶, sa dissolution dans l'eau sous forme aqueuse (CO_{2aq}) lui fait prendre part à plusieurs processus chimiques, physiques et biologiques, et le rend instable. Il réagit en premier lieu avec la molécule d'eau (H_2O) pour donner de l'acide carbonique

4. Mot utilisé par les anglo-saxons pour désigner des systèmes, des moyens et des mesures d'atténuation d'effets.

5. Partie Par Million en volume, est un terme utilisé par les scientifiques pour exprimer un rapport de 10^{-6} soit l'équivalent de 1 gramme par tonne par exemple.

6. Ne participent pas à des réactions chimiques.

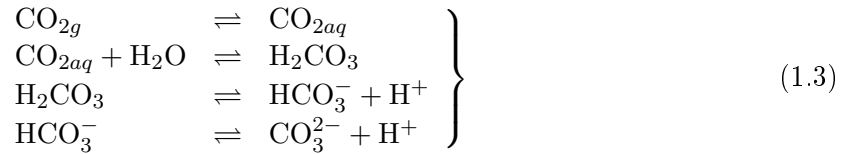
(H_2CO_3), très vite, celle-ci à son tour va se dissocier au contact du H_2O pour donner des ions carbonates (CO_3^{2-}) et bicarbonates (HCO_3^-) avec une proportion respective de 9% et 90%; en effet, l'acide carbonique et le CO_{2aq} sont électriquement neutres et ne représentent que 1% du tout. La somme des concentrations de ces éléments est appelée carbone inorganique total dissous (DIC pour dissolved inorganic carbon) ou plus communément carbone total C_T :

$$C_T = [\text{CO}_{2aq}] + [\text{H}_2\text{CO}_3] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] \quad (1.1)$$

Les changements de proportions de ces différentes formes de CO_2 lors de sa dissolution dans l'eau sont donnés par rapport au $p\text{H}$ dans la figure 1.5 ; à noter que le $p\text{H}$ de l'eau de mer varie entre 7,5 et 8,4. Du fait de la faible quantité et impact du H_2CO_3 et du CO_{2aq} , ils sont souvent regroupés sous l'appellation CO_2^* :

$$\text{CO}_2^* = [\text{CO}_{2aq}] + [\text{H}_2\text{CO}_3] \quad (1.2)$$

Toutes ces formes inorganiques de CO_2 dans l'eau sont reliées par des équilibres chimiques qui peuvent être résumés dans l'ensemble d'équations suivantes qui définissent le système des carbonates (DOE, 1994)



Ces équilibres sont régis par des constantes d'équilibre nommées K_1 et K_2 qui dépendent de la température, de la salinité et de la pression :

$$K_1 = [\text{HCO}_3^-] [\text{H}^+] / [\text{CO}_2^*] \quad (1.4)$$

$$K_2 = [\text{CO}_3^{2-}] [\text{H}^+] / [\text{HCO}_3^-] \quad (1.5)$$

L'étude de l'acidité des océans fait nécessairement appel à l'étude de l'alcalinité. La définition la plus courante dans la littérature scientifique est celle de Dickson (1981), qui stipule que "*l'alcalinité total (A_T) de l'eau est le nombre d'ions hydrogènes nécessaires pour neutraliser l'excès de protons accepteurs (base formée à partir d'acide faible⁷ dont le pK_a ⁸ > 4,5, à 25°C) dans 1 kg d'eau de mer*" (les points de suspension font référence à certaines bases et acides à faible contribution $< 1\mu\text{mol.kg}^{-1}$ et négligeable de façon générale) (DOE, 1994) :

$$\begin{aligned} A_T = & [\text{HCO}_3^-] + 2 [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{B}(\text{OH})_4^-] + [\text{OH}^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] \\ & + 2 [\text{PO}_4^{3-}] + [\text{SiO}(\text{OH})_3^-] + [\text{HS}^-] + [\text{NH}_3] + \dots \\ & - [\text{H}^+] - [\text{HSO}_4^-] - [\text{HF}] - [\text{H}_3\text{PO}_4] - \dots \end{aligned} \quad (1.6)$$

La variabilité de l'alcalinité totale de l'eau est directement liée à celle de la salinité qui est donc étroitement dépendante des processus physiques tel que le mélange des masses d'eau, l'évaporation et les précipitations (ou tout apport en eau douce).

7. Un acide faible ou une base faible sont respectivement un acide ou une base dont la réaction sur l'eau n'est pas totale contrairement aux acides et bases forts.

8. $pK_a = -\log_{10}K_a$, K_a étant une mesure quantitative de la force d'un acide en solution

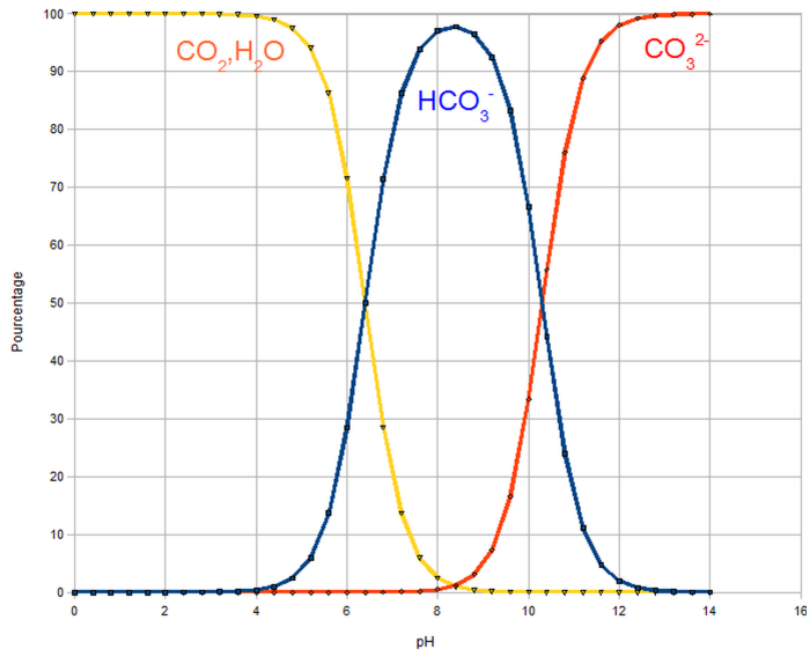


FIGURE 1.5 – Pourcentage des proportions des différentes formes de carbone dissous en fonction du pH (Solubilité et pH , le CO_2 , <http://www.ac-grenoble.fr/>).

1.2.2 L'acidification de l'eau de mer

L'acidification des océans correspond à une diminution du pH de l'océan sur une échelle de temps assez longue (dix ans ou plus) qui est principalement causée par l'absorption de CO_2 atmosphérique. Elle peut également être causée par d'autres processus mineurs à l'échelle globale, comme les apports d'azote et de soufre atmosphérique (Doney *et al.*, 2007). Les apports en sels nutritifs et en matière organique par les rivières ainsi que les processus biogéochimiques côtiers peuvent faire varier l'acidification provoquée par le CO_2 atmosphérique (Borges, 2011; Cai *et al.*, 2011) (plus en détails dans la section 1.2.4). L'acidification est donc une expression désignant une série de modifications chimiques de l'eau qui, via l'absorption du CO_2 entraîne un bouleversement de la chimie océanique en diminuant le pH . À terme, ceci peut avoir un effet direct sur les organismes marins et plus spécialement les coraux et certains planctons qui auront des difficultés à maintenir leur squelette externe en carbonate de calcium (Orr *et al.*, 2005). Le carbone dans l'eau est donc régi par le système des carbonates vu en section 1.2.1, dit système *acide-base* dérivé à partir de la dissolution du CO_2 dans l'eau (Figure 1.6).

Pour bien comprendre l'effet du CO_2 dans l'acidification il faut auparavant comprendre l'effet tampon des océans. Ce dernier fait référence au fait qu'un apport ou une consommation de CO_2 dans un milieu se fait à pH constant ; c'est-à-dire mesurer le pouvoir d'une solution à réduire les variations du pH lors de l'ajout d'acides ou de bases. Or, l'absorption de CO_2 augmente l'abondance des ions H^+ , et même si l'océan a la capacité d'absorber l'excès de CO_2 atmosphérique en réajustant l'équilibre chimique (Équation (1.3), section 1.2.1), la dissolution d'une partie des

ions bicarbonates en carbonates suivant la même équation va libérer des ions H^+ . À long terme ces ions H^+ contribuent à la diminution du pH (acidification du milieu), entraînant par la même occasion à la diminution de l'effet tampon et donc plus de CO_2 dans l'atmosphère.

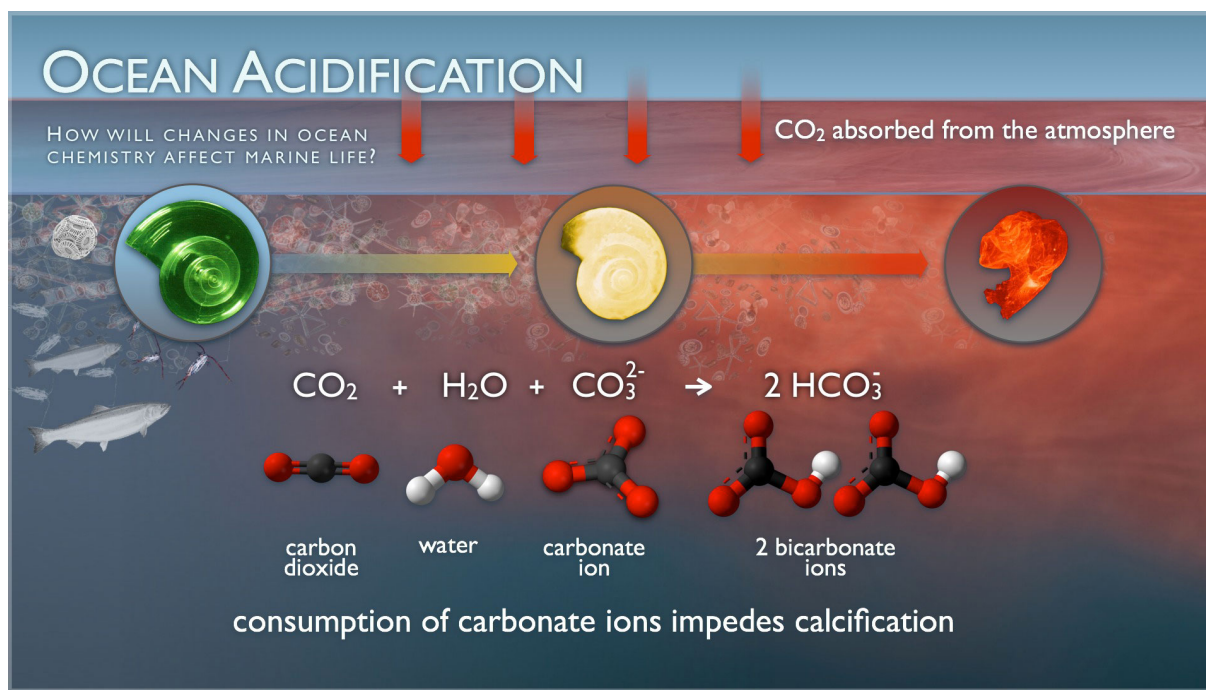


FIGURE 1.6 – Processus d'acidification de l'océan (NOAA PMEL Carbon Group, <http://www.pmel.noaa.gov/co2/>)

Historiquement, la recherche sur l'acidification des océans est plutôt récente, dans Gattuso et Hansson (2011), on retrouve une analyse bibliographique d'articles et d'auteurs par année qui montre qu'entre 1906 et 2012, 88% des articles publiés traitant d'acidification des océans étaient après 2003, une augmentation exponentielle d'un facteur 16 a été remarquée dans ce domaine de recherche ; de 22 articles en 2004 à 353 en 2012. Cette même étude montre que les régions les plus étudiées sont l'Atlantique et le Pacifique Nord, l'effort de recherche étant donc déséquilibré, avec peu d'études sur les régions polaires, où l'effet de l'acidification est prévu plus tôt qu'ailleurs car la température très basse augmente l'absorption du CO_2 . C'est à cause de ce déséquilibre entre les mesures et les modèles que les régions polaires ont reçu une attention croissante ces dernières années (Monaco, 2014).

Une étude plus récente confirme cette tendance et montre que plus de 37 nations sont impliquées directement dans ces études et que c'est en grande partie l'Europe et les États-Unis d'Amérique, suivis de l'Australie, de la Chine et du Japon, avec une récente augmentation en Amérique du Sud et en Inde (Mathis *et al.* (2015) ; Figure 1.7)

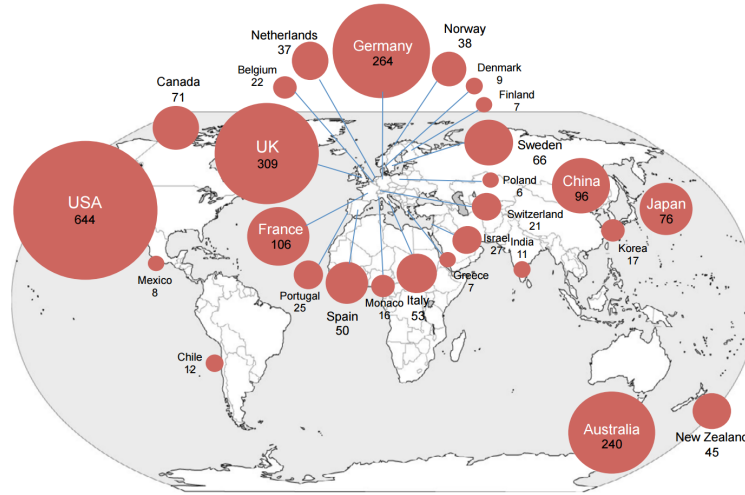


FIGURE 1.7 – Recensement national des articles traitants de l'acidification des océans entre 2005 et 2014 pour les pays avec au moins cinq articles publiés (Figure 2 dans Mathis *et al.* (2015)).

1.2.3 Pression partielle ou fugacité du CO_2 ?

Étudier le CO_2 dans l'air ou dans l'eau revient à étudier la place qu'il occupe dans ceux-là en terme de quantité et de pression exercée, on parle alors de pression partielle de ce gaz.

La pression partielle P d'un mélange de gaz supposé parfait, telle que définie par la loi de Dalton⁹, est "*la somme des pressions partielles des différents gaz qui le composent*". On définit alors la pression partielle d'un gaz comme la pression qu'il aurait s'il occupait seul le volume considéré et s'il n'avait aucune interaction avec les autres gaz. Le CO_2 étant un gaz non parfait, il est plus juste et plus approprié de parler de fugacité f .

Le rapport établi entre la pression partielle et la fugacité du CO_2 varie dans l'intervalle $[0,996-0,997]$. On considère la différence entre la $f\text{CO}_2$ et la $p\text{CO}_2$ de l'ordre de $1 \mu\text{atm}$ (DOE, 1994), cette différence étant négligeable au vu de l'erreur associée à la mesure (de l'ordre de 2 à $5 \mu\text{atm}$), on utilisera dans cette étude le terme fugacité du CO_2 avec la notation $f\text{CO}_2$. En complément aux équations (1.4) et (1.5), on détermine le coefficient de solubilité du CO_2 α ($\mu\text{mol.kg}^{-1}.\mu\text{atm}^{-1}$), par la loi de Henry qui dépend de la salinité, de la température et de la pression (Weiss, 1974) :

$$[\text{CO}_2^*] = \alpha [f\text{CO}_2] \quad (1.7)$$

α diminue quand la température augmente, on en déduit alors que les eaux froides absorbent plus de CO_2 que les eaux chaudes. Dans le chapitre suivant, on présentera les variations de la $f\text{CO}_2$ dans la région étudiée.

9. La loi de Dalton s'écrit mathématiquement sous la forme $P = \sum p_i$, avec P la pression totale du mélange et p_i la pression partielle de chaque constituant.

1.2.4 Distribution des paramètre du CO_2

Plusieurs *processus* (ou *pompe*) sont à l'origine de la distribution du C_T :

- Processus thermodynamiques : tout système chimique est affecté par les changements de température. L'équilibre des carbonates est donc modifié avec la variation de la température. Comme précisé précédemment, le coefficient α est directement affecté par le changement de température et par conséquent, amène à un changement de la $f\text{CO}_2$ suivant une relation inverse.
- Processus biologiques : deux grandes parties composent l'activité biologique marine, d'un côté, la photosynthèse qui, grâce à l'énergie lumineuse, transforme le carbone inorganique total dissous et les nutriments en matière organique et contribue donc la diminution de la $f\text{CO}_2$, et de l'autre, l'augmentation de la $f\text{CO}_2$ par la formation de squelette (structure de carbonate de calcium) par certains organismes marins (la famille des coraux, les mollusques et crustacés, etc.) et la respiration assurée en grande partie par les bactéries (voir figure 1.8 pour plus de détails).
- Processus physiques : les courants verticaux cités dans la section 1.1 sont en grande partie responsables des mouvements de masses d'eau, on a le *downwelling* qui contribue au stockage du carbone dans les eaux profondes ; sous l'effet du froid et de la salinité, les eaux en hautes latitudes deviennent plus denses et plongent vers la profondeur (Figure 1.3), l'autre phénomène inverse est l'*upwelling*¹⁰ qui transporte avec lui les sels nutritifs et du carbone vers la surface pour être utilisés dans l'activité biologique (Figure 1.9).

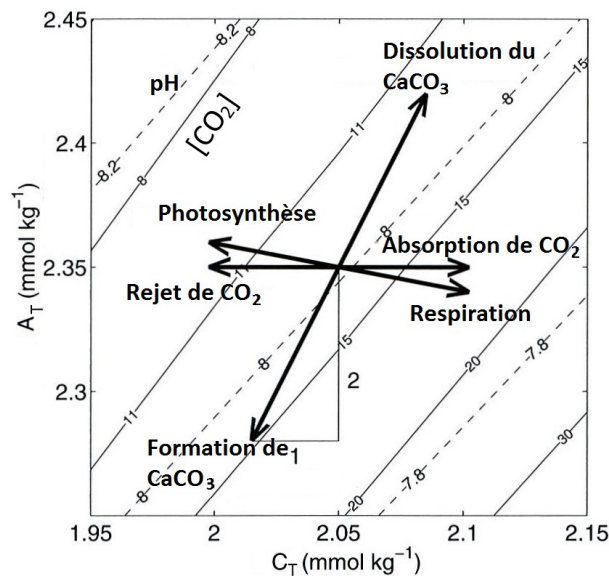


FIGURE 1.8 – Effet des différents processus chimiques sur la variation du C_T et de l' A_T (Zeebe et Wolf-Gladrow, 2001).

10. Se produit lorsque de forts vents marins (généralement des vents saisonniers) poussent l'eau de surface des océans laissant ainsi un vide où peuvent remonter les eaux de fond, caractérisé par une mer froide et riche en phyto-plancton.

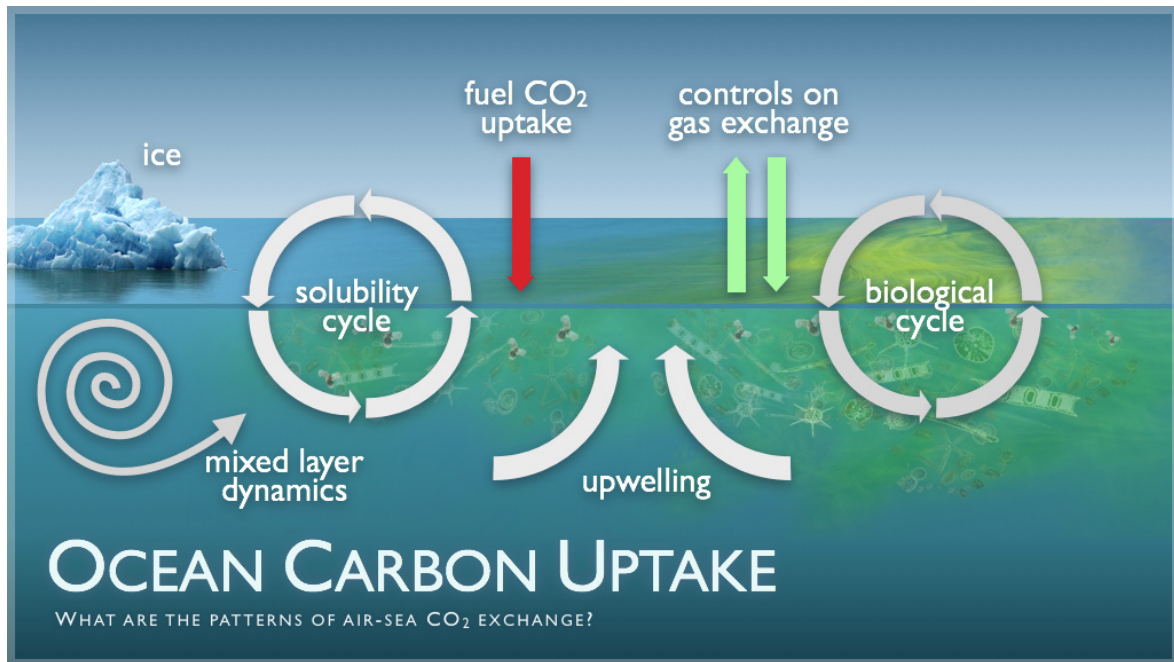


FIGURE 1.9 – Principeaux processus affectant la distribution des paramètres du CO₂ (NOAA PMEL Carbon Group, <http://www.pmel.noaa.gov/co2/>)

1.3 Échanges océan-atmosphère

Afin de mieux appréhender l'acidification, cette thèse doit nécessairement s'intéresser à l'étude et l'estimation de l'échange de CO₂ à l'interface air-mer. Mettre des chiffres sur ce type d'échange est très important pour comprendre la réaction des océans par rapport à l'augmentation des gaz à effet de serre dans l'atmosphère.

Le *flux* de CO₂ à l'interface air-mer est donnée par :

$$FCO_2 = \beta_0 \cdot k \cdot (fCO_2^{eau} - fCO_2^{air}) \quad (1.8)$$

avec :

- FCO_2 est le flux de CO₂ à l'interface air-mer exprimé en $\text{mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$.
- β_0 est le coefficient de solubilité exprimé en $\mu\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \mu\text{atm}^{-1}$.
- k est la vitesse (ou coefficient) de transfert exprimé en $\text{cm} \cdot \text{h}^{-1}$.
- fCO_2^{eau} est la fugacité du gaz carbonique dans la couche de surface de l'eau exprimée en μatm .
- fCO_2^{air} est la fugacité du gaz carbonique dans la couche d'air au contact de l'eau exprimée en μatm .

On note souvent ΔfCO_2 la différence entre les deux fugacités ($fCO_2^{eau} - fCO_2^{air}$).

Le coefficient de solubilité β_0 est calculé suivant Weiss (1974) (équation 1.9) en fonction de la température et de la salinité. La détermination du paramètre k est, quant à elle, plus

problématique; elle dépend essentiellement de l'agitation de la couche de surface et donc du vent de surface u ($m.s^{-1}$). De nombreux travaux sont réalisés depuis des dizaines d'années pour exprimer, par des formules empiriques, la relation entre k et u ; cela va des premières relations simples de Liss et Merlivat (1986) à d'autres quadratiques et cubiques. On présente dans le tableau 1.1 toutes les relations prises en compte dans cette études, on verra dans la suite des chapitres la différence résultante de ces différentes formules. A noter que, quelle que soit la formule, celle-ci est toujours calculée en fonction de la vitesse du vent u mesuré à 10 m de hauteur, mais aussi du nombre de Schmidt Sc^{11} calculé suivant l'équation 1.10.

$$\beta_0 = exp(a_1+(a_2 \times (100/T))+(a_3 \times log(T/100))+S \times (a_4+(a_5 \times (T/100))+(a_6 \times (T/100)^2))) \quad (1.9)$$

avec $a_1 = -60,2409$, $a_2 = 93,4517$, $a_3 = 23,3585$, $a_4 = 0,023517$, $a_5 = -0,023656$ et $a_6 = 0,0047036$, T la température (à convertir en °K) et S la salinité (Weiss, 1974).

$$Sc = a_1 - (a_2 \times T) + (a_3 \times T^2) - (a_4 \times T^3) \quad (1.10)$$

avec $a_1 = 2073,1$, $a_2 = 125,62$, $a_3 = 3,6276$, $a_4 = 0,043219$ et T la température (Wanninkhof, 1992).

	Référence	Formule
1	Liss et Merlivat (1986)	si $u < 3,6$ alors $k = 0,170.u.(\frac{Sc}{600})^{-\frac{2}{3}}$ sinon si $3,6 < u \leq 13$ alors $k = (2,85.u - 9,65).(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$ sinon $k = (5.u - 49,3).(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$
2	Wanninkhof (1992)	si $u \leq 6$ alors $k = 0,31.u^2.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$ sinon $k = 0,39.u^2.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$
3	Wanninkhof et McGillis (1999)	$k = 0,0283.u^3.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$
4	Nightingale <i>et al.</i> (2000)	$(0,222.u^2 + 0,333.u).(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$
5	Jean-Baptiste <i>et al.</i> (2002)	$k = 1,45.u^{1,5}.(\frac{Sc}{310})^{-0,5}$
6	Ho <i>et al.</i> (2006)	$k = 0,266.u^2.(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$
7	Sweeney <i>et al.</i> (2007)	$k = 0,27.u^2.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$
8	Wanninkhof <i>et al.</i> (2009)	$k = 3 + 0,1.u + 0,064.u^2 + 0,011.u^3.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$
9	Ho <i>et al.</i> (2011) (a)	$k = 0,286.u^2.(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$
10	Ho <i>et al.</i> (2011) (b)	$k = 0,0298.u^3.(\frac{Sc}{600})^{-0,5}$
11	Wanninkhof (2014)	$k = 0,251.u^2.(\frac{Sc}{660})^{-0,5}$

TABLEAU 1.1 – Liste des formules pour le calcul du coefficient de transfert k , u est la vitesse du vent et Sc le nombre de Schmidt

Une des notions les plus importantes à retenir, c'est que le ΔfCO_2 est le paramètre déterminant le sens de l'échange; en effet, le ΔfCO_2 étant la différence $fCO_2^{eau} - fCO_2^{air}$, le signe de cette différence représente la direction du CO_2 ; si celui-ci est négatif alors il y a moins de CO_2

11. Utilisé pour caractériser les écoulements de fluides dans lesquels interviennent simultanément viscosité et transfert de matière. Il n'a pas d'unité car il représente le rapport entre la Viscosité cinématique et le Coefficient de diffusion du fluide, tout deux exprimé en $m^2.s^{-1}$.

dans l'eau que dans l'air, l'eau absorbera donc le CO_2 en plus dans l'air, on dit alors que l'océan se comporte comme un *puits* de CO_2 , au contraire, s'il y a plus de CO_2 dans l'eau que dans l'air, la différence sera positive, d'où une émission du CO_2 de l'océan vers l'air, et on parlera alors de *source* de CO_2 .

1.4 La télédétection

Nous nous intéressons dans cette thèse à l'utilisation de la télédétection et l'apport que peuvent apporter les images satellitaires¹² (nous utiliserons l'abréviation *sat* pour le mot *satellitaire(s)* dans le reste du manuscrit). En effet, il est clair que, de nos jours, l'utilisation de données *sat* s'est démocratisée grâce au développement technologique.

Dans notre cas, s'il l'on souhaite utiliser les données *sat*, c'est essentiellement parce qu'elles proposent une couverture spatiotemporelle beaucoup plus grande que les données *in situ*, mais plus encore ; la mise en place de modèles permettant l'utilisation de paramètres disponibles par satellite pour l'estimation d'autres paramètres, permet bien évidemment une économie très conséquente en ce qui concerne les traversées en bateau. Notons, toute fois, que nous ne pouvons pas encore nous passer des données *in situ* car c'est avec elles que nous construisons des modèles (c'est les données *in situ* qui servent aussi à la validation et la calibration des données *sat*).

Dans cette section, on présentera de manière générale les satellites et les différentes technologies d'acquisition de données. Par la suite, on présentera un aperçu sur l'utilisation des données *sat* dans le domaine de l'océanographie.

Le manuel de télédétection¹³ spatiale TELECAN, promu par l'*Universidad de Las Palmas de Gran Canaria* (ULPGC) et la *Sociedad de Promoción Económica de Gran Canaria* (SPEGC), définit la télédétection spatiale comme "*une discipline scientifique qui intègre un large éventail de compétences et de technologies utilisées pour l'observation, l'analyse et l'interprétation des phénomènes terrestres, atmosphériques et océaniques*". Ses principales sources sont les mesures obtenues à l'aide de plates-formes aériennes et spatiales. Comme son nom même l'indique, la télédétection est l'acquisition de l'information à distance, sans contact direct avec l'objet étudié. La figure 1.10 présente un aperçu des différentes sources de données récupérées par les satellites.

1.4.1 Bref historique de la télédétection

L'histoire de la télédétection peut être vue de plusieurs façons, plus ou moins indépendantes, car elle fait appel à plusieurs disciplines, et elle même a touché à différents domaines aux fils des années.

Pour commencer, le capteur, l'élément principal qui recueille les données s'est vu amélioré et doté de technologies nouvelles. Le premier né de la télédétection est la chambre photographique,

12. Le terme "Satellitaire" a été officiellement adopté en 2013 pour définir des données provenant d'un satellite (Commission générale de terminologie et de néologie, 2013), on peut aussi retrouver dans la littérature le terme "satellitale".

13. L'étymologie du mot télédétection vient de deux racines, "*télé* et *détection*". *télé* est d'origine grecque et signifie (*de/au*) *loin*, *détection* vient du même mot en anglais qui lui est d'origine latine ; du verbe *detego* qui signifie *découvrir* formé lui-même à partir du préfixe *de* (qui inverse le sens du verbe qui le suit) et du verbe *tego* qui signifie *couvrir*. D'après son étymologie, le mot signifie donc *action de découvrir à distance*.

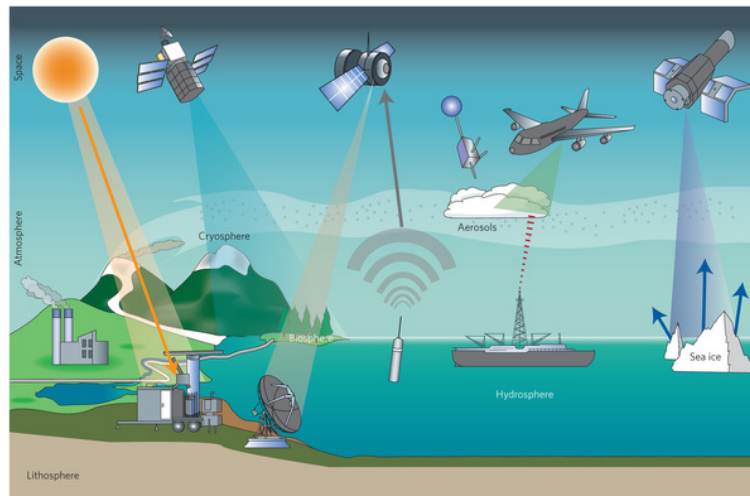


FIGURE 1.10 – Principales sources de données pour les satellites (Yang *et al.*, 2013).

constituée d'une optique et d'une plaque photosensible. Les besoins de la topographie ont très tôt fait de ce capteur un instrument d'une grande précision métrique. Vient après les systèmes à balayage, les plans focaux numériques et les filtres permettant l'acquisition de différentes longueurs d'onde. L'évolution technologique a permis de passer de la caméra optique qui fonctionne dans le visible et dans le proche infrarouge à la caméra thermique et aux radars imageurs, qui permettent d'observer de jour comme de nuit indépendamment des conditions météorologiques.

Un autre aspect du développement de la télédétection sont les *plates-formes*. Le premier de ces *porteurs* utilisés en télédétection a été le ballon. En 1855, Nadar prend la première photographie aérienne en ballon et dépose en 1858 un brevet pour un *nouveau système de photographie aérostatique*. Le développement de l'aviation a aussi fait des avions les porteurs les plus répandus au début, indépendamment des hélicoptères, des ballons et des drones. C'est depuis les années soixante, que les capteurs sont embarqués sur des satellites orbitaux à basses altitudes (200 à 400 km) pour des missions à courte durée puis entre 500 et 1500 km pour l'observation de la terre.

Le facteur temps joue aussi un rôle très important, car la couverture aérienne, de nos jours, est plus souvent mise à jour. Les archives permettent d'avoir une profondeur historique¹⁴ offrant des possibilités nouvelles comme l'étude de l'évolution d'un paysage naturel, étudier la géologie des terrains avant l'urbanisation ou plus encore, permet de dialogue transgénérationnel sur l'environnement dans le passé et le futur.

Enfin, ce qui a le plus marqué l'avancée technologique de la télédétection c'est le travail fourni dans toutes les disciplines qui utilisent la télédétection ; du pré-traitement des données à l'interprétation en passant par la gestion des bases de données, c'est bien l'effort fourni et les axes de développements créés au fil des années qui ont bouleversé l'utilisation des données *sat*, et permettent de nos jours, leur exploitation très simple dans des domaines divers et variés.

14. Des archives sur un même endroit observé à différentes périodes depuis plus de cinquante ans.

1.4.2 Principe général

Maîtriser les principes de la télédétection c'est avoir une bonne connaissance des rayonnements électromagnétiques ainsi que leurs comportements au contact d'une surface et à travers l'atmosphère. En effet, les capteurs sont des radiomètres imageurs, ils mesurent des rayonnements émis ou réfléchis par un objet qui sont ensuite réorganisés pour former une image.

Le rayonnement électromagnétique est modélisé par une onde électromagnétique qui représente une propagation de l'énergie dans la nature (POLIDORI, 2001). La forme la plus familière est la lumière visible à l'œil humain. Les ondes électromagnétiques correspondent à deux champs, électrique (E) et magnétique (M) disposés perpendiculairement l'un par rapport à l'autre, se déplaçant dans le vide à une vitesse de $299\,793\text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ (la vitesse de la lumière). On caractérise ces ondes par leur vitesse et par trois autres notions représentées dans la figure 1.11 :

- La longueur d'onde λ est la distance entre deux oscillations des champs. On la mesure en micromètres ($1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$), en nanomètres ($1\text{ nm} = 10^{-9}\text{m}$) ou en angström ($1\text{ \AA} = 10^{-7}\text{m}$).
- La fréquence ν est le nombre d'oscillations des champs en un temps donné (1 cycle par seconde = 1 hertz ; un cycle est le temps de passage entre deux crêtes successives en un point, la période est le temps durant lequel se déroule un cycle) (Lillesand *et al.*, 2008).
- La polarisation détermine si l'onde est polarisée rectilignement ou elliptiquement (figure 1.11).

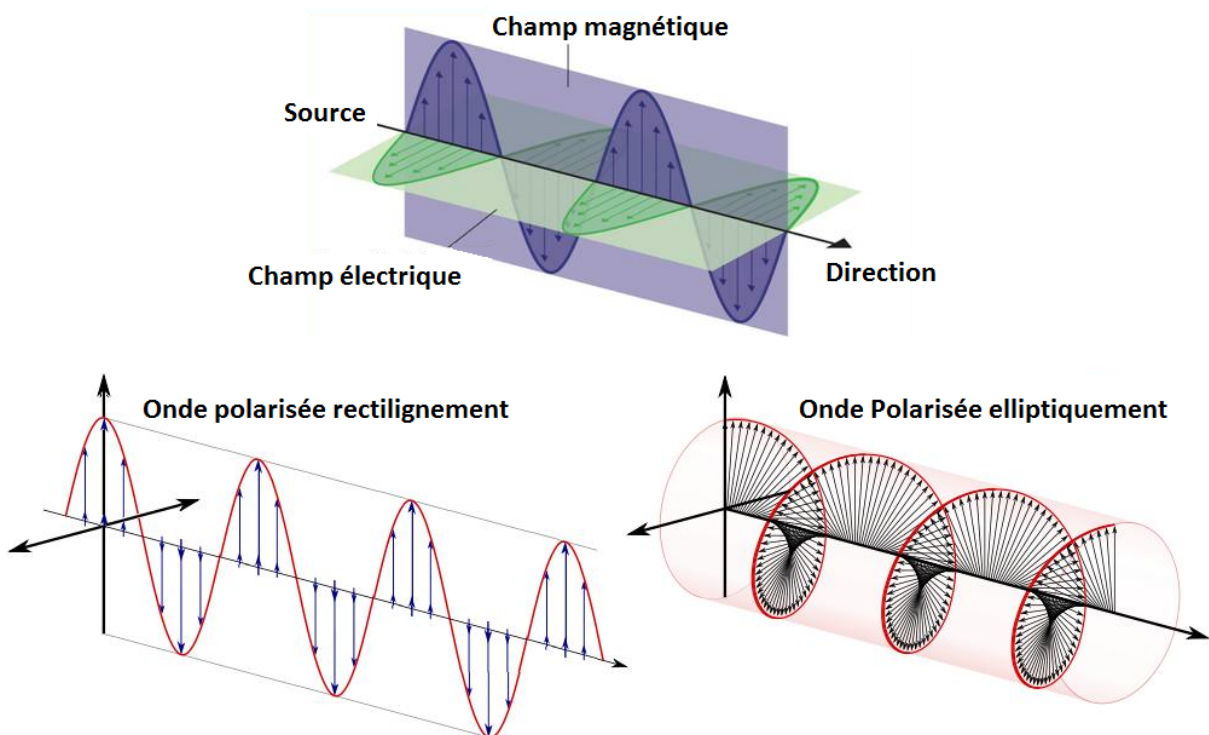


FIGURE 1.11 – Schématisation d'une onde électromagnétique et ses polarisations.

Le spectre électromagnétique présente toutes les gammes d'ondes des plus petites longueurs d'ondes aux plus grandes avec leurs fréquences respectives (Figure 1.12). Les ondes les plus utilisées en télédétection sont le visible, le proche infra-rouge et l'infrarouge qu'on appelle aussi thermique.

Pour comprendre comment un satellite capte l'information, il faut introduire deux notions :

- La réflectance : qui représente la réflexion d'un rayonnement sur une surface géographique (sol ou océan).
- Les deux types de satellites : les passifs qui comportent un capteur conçu pour enregistrer la radiation solaire réfléchi par la Terre, il ne peut acquérir des images que du côté de la Terre éclairée par le soleil, et les satellites actifs qui ont leur propre source d'illumination, et qui peuvent observer tant la partie illuminée que la partie ombragée de la Terre.

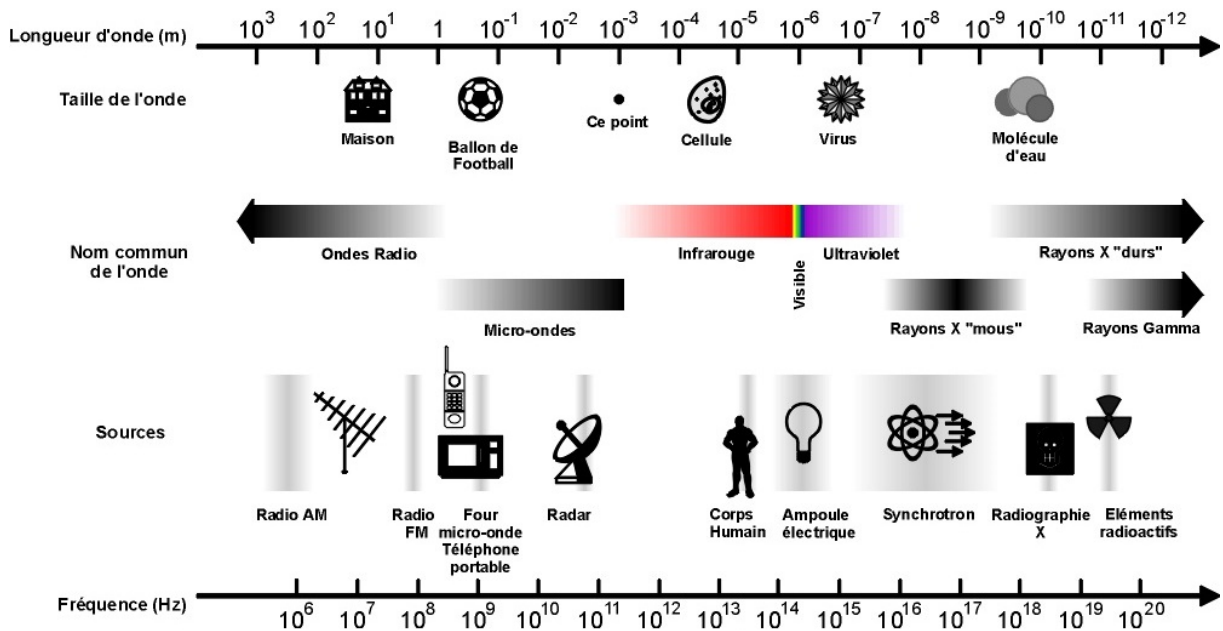


FIGURE 1.12 – Récapitulatif des ondes du spectre électromagnétique (Chevalier, 1999).

C'est suivant l'interaction d'un rayonnement par rapport à une surface (dit cible) qu'on détermine la nature (ou un autre paramètre) de la surface étudiée, on parle alors de *signature spectrale*. Lorsque l'énergie atteint la cible, la surface peut *absorber* l'énergie incidente, la *transmettre* ou la *réfléchir*, la transmission d'un rayonnement induit la plupart du temps à une *réfraction* du fait du changement du milieu. L'interaction de cette énergie incidente totale avec la surface se fait donc suivant ces trois modes d'interaction ou leurs combinaisons, cela dépend essentiellement de la longueur d'onde de l'énergie, ainsi que de la nature et des conditions de la surface. Il est à noter que l'atmosphère contribue lui aussi absorber ou diffuser le rayonnement. La figure 1.13 présente les trois types d'interactions et donne un exemple de signature spectrale ; on remarque que la chlorophylle présente dans la végétation absorbe fortement le rayonnement aux longueurs

d'onde du rouge et du bleu, mais réfléchit le vert ; les feuilles, qui contiennent un maximum de chlorophylle, sont donc plus vertes. Par le même principe, l'eau absorbe davantage les grandes longueurs d'onde du rayonnement visible et du proche infrarouge, elle paraît généralement bleu ou bleu-vert car elle réfléchit davantage les petites longueurs d'onde et paraît encore plus foncé sous les longueurs d'onde du rouge ou du proche infrarouge. Lorsque les couches supérieures de l'eau contiennent des particules comme des sédiments en suspension, la transmission diminue, la réflexion augmente et l'eau paraît plus brillante.

En mesurant l'énergie réfléchié ou émise par la cible avec une variété de longueurs d'ondes, nous pouvons donc construire la signature spectrale pour chaque cible. En comparant les signatures de différentes cibles, nous pouvons les distinguer les uns des autres. Il est donc tout aussi important d'avoir ces variétés de longueurs d'ondes, sinon cette distinction ne serait pas possible.

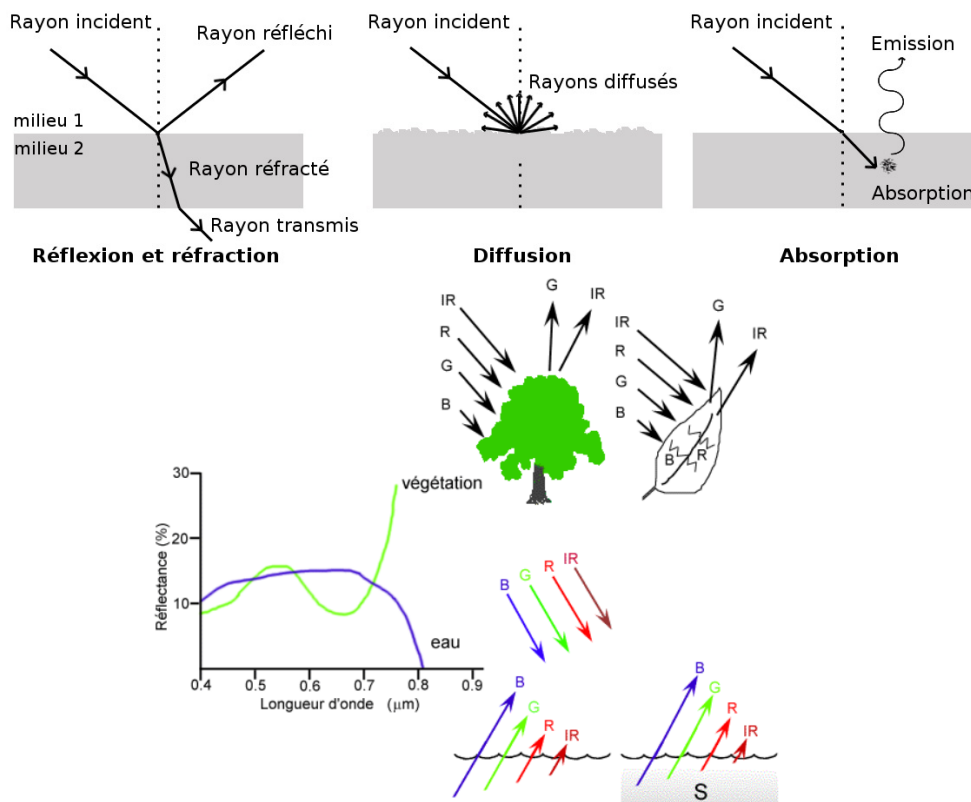


FIGURE 1.13 – Représentation schématique des différents type d'interaction du rayonnement électromagnétique en haut (Harold Clenet, <http://harold-clenet.com/>) et un exemple de signature spectrale en bas (Notions Fondamentales en télédétection, Centre Canadien en Télédétection, <https://cours.etsmtl.ca>).

1.4.3 Accessibilité aux données

Tout le travail de la télédétection n'est rien sans son traitement au sol. Comme cité précédemment, le satellite est là pour capter le rayonnement, et c'est la variation de ce dernier suivant la source du rayonnement incident que le satellite capte ces ondes. Cette transmission aux satellites est porteuse d'informations diverses sur la cible étudiée sous forme d'un signal qu'il faut décoder, transformer ou même améliorer et corriger pour en retirer les informations. Ce processus post-acquisition est le troisième plus grand challenge auquel font face les agences et bases spatiales après la construction du satellite et sa mise en orbite (lancement et positionnement). En effet, la suite de signaux acquis par un satellite doit être transmise à une *station de réception* sur Terre, les modes de transmission font eux l'objet d'un axe de recherche propre à lui même mêlant électronique, réseaux, cryptographie, etc.

Les données récupérées au niveau de la station sont alors traitées et mis en forme afin de permettre leur traduction puis leur interprétation suivant les besoins de l'utilisateur, ceci se fait au moyen d'*algorithmes de traitement*. Ces algorithmes transforment les données brutes en données sous un format standard pour permettre aux scientifiques dans diverses domaines de les utiliser. On peut par exemple cité celui de l'*Ocean Biology Processing Group* (OBPG) qui produit et distribue un ensemble d'algorithmes compatibles avec les capteurs embarqués sur le satellite MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer, présenté en détails dans le chapitre 2) et qui permet entre autres d'avoir une estimation de la concentration en chlorophylle_a des océans (Figure 1.14).

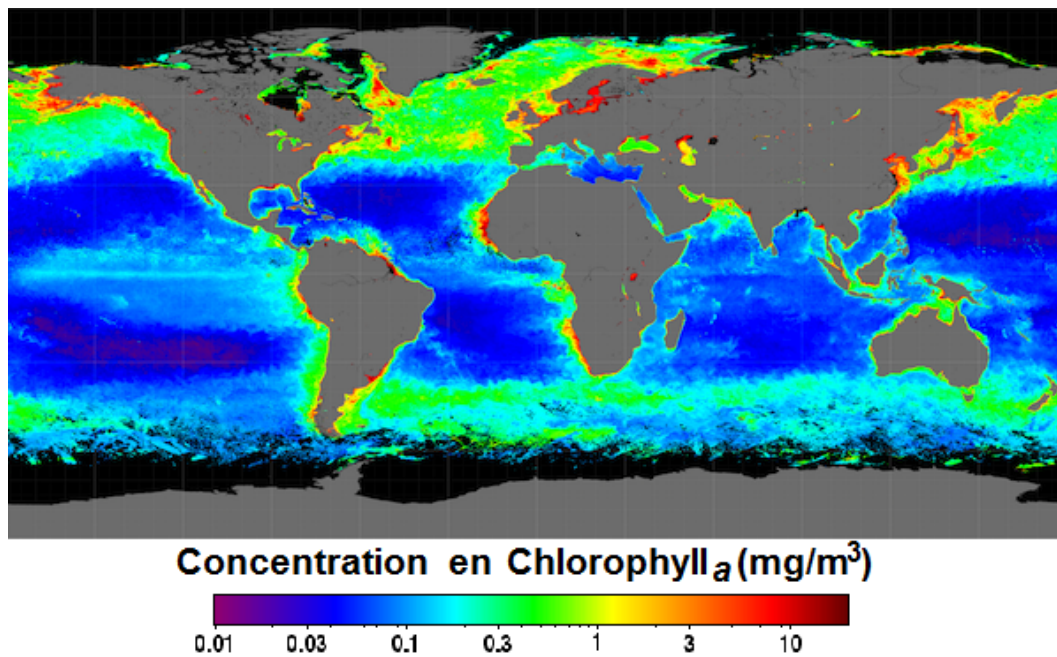


FIGURE 1.14 – Exemple d’image satellite de concentration de Chlorophyll_a des océans (été 2014) produit par le satellite MODIS (Chlorophyll_a, Algorithm Descriptions, <http://oceancolor.gsfc.nasa.gov/>).

Il faut en outre savoir que ces types d’algorithmes sont le plus souvent mis en place en partant de données *in situ*, à partir des quelles, des relations ont été tirées afin de passer des paramètres du rayonnement capté par le satellite à une représentation des données sous forme de cartes géographiques. Une fois le satellite en orbite, le travail des chercheurs continue dans le développement de ces algorithmes, on dit alors qu’ils font un travail de *calibrage* des données. C’est avec ces données que s’est établi le travail de cette thèse.

Ce premier chapitre vient introduire la problématique étudiée dans cette thèse ; l’acidification des océans et ces causes. Il a été question de mettre en avant les principaux facteurs influant sur le changements de la chimie des eau du monde, du point de vue échange avec l’atmosphère mais aussi de l’échange entre océans via les courants marins.

C’est l’estimation et le calcul de ce flux à l’interface air-mer qui peut apporter plus d’informations sur le taux de CO₂ absorbé ou rejeté par l’océan.

Par ailleurs, comme nous nous baserons sur des données satellitaires dans nos expérimentations, une bref introduction dans le domaine de la télédétection à ensuite été présenté afin de faciliter la compréhension des différentes sources de données et la lecture de la suite des chapitres.

Chapitre 2

DONNÉES ET MÉTHODES

Dans ce chapitre, nous entamons la description des données utilisées dans cette thèse. On présente dans un premier temps les données *in situ* qui ont été mises à notre disposition ainsi que celles récoltées en mer lors de notre campagne en 2014. Une analyse détaillée sera réalisée sur ces données afin de comprendre la variation de chacun des paramètres au cours de la saison étudiée ainsi que la variation inter-annuelle de ces dernières. Par la suite, nous passerons à la présentation des données *sat*, leurs avantages et inconvénients ainsi que le mode d'exploitation de ces données. Une troisième section dans ce chapitre présentera toutes les méthodes développées et utilisées dans la lecture, le pré-traitement, la modélisation ou tout autre méthode appliquée aux données.

Cette thèse a pour but de mettre en place des algorithmes et des codes sources afin de présenter une palette d'outils informatiques facilitant l'utilisation des données *in situ* dans un premier temps et permettant par la suite l'utilisation de celles-ci pour la modélisation, la lecture des données *sat* pour les tests et la cartographie des estimations. Ainsi, la première chose à noter est que le développement des programmes pour cette étude a été réalisé en langage MATLAB[®] sur la plateforme du même nom. Tous les algorithmes et codes seront présentés avec ce langage ; pour faciliter la lecture et la compréhension de chaque partie, des commentaires viendront donner plus d'explications sur chaque étape.

2.1 Données *in situ*

Dans cette section, les différentes sources de données *in situ* seront présentées et la variabilité de chaque donnée sera étudiée dans la région concernée.

2.1.1 Les sources de données

Nous avons eu à notre disposition trois sources de données pour les expérimentations, provenant de deux projets scientifiques et d'une station fixe :

2.1.1.1 Le projet MINERVE

Le projet MINERVE (Mesures à l'INterface Eau-aiR de la Variabilité des Échanges de CO₂) part de l'idée qu'une meilleure compréhension du cycle du carbone océanique, ainsi que l'impact de l'océan vis-à-vis d'une augmentation de l'effet de serre, nécessitent que l'on observe les varia-

tions saisonnières à moyenne échelle de la pression partielle de dioxyde de carbone ($p\text{CO}_2$) dans les eaux de surface de l’océan mondial.

Le programme MINERVE faisait l’objet d’une coopération scientifique entre des chercheurs du CSIRO (Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation) localisé à Hobart - Australie et l’équipe du LBCM (Laboratoire de Biogéochimie et Chimie Marines - Université Pierre et Marie Curie). Aujourd’hui, MINERVE est une composante du CARAUS (CARbone AUstral) de l’Observatoire de Recherche en Environnement (ORE) du Ministère de la Recherche. MINERVE est associé depuis 2003 aux campagnes OISO (Océan Indien Service d’Observation, une composante du CARAUS aussi) et sont soutenues par l’INSU (Institut National des Sciences de l’Univers), l’IPEV (Institut polaire français Paul Emile Victor et l’IPSL (Institut des sciences de l’environnement Pierre Simon Laplace).

Le but du programme MINERVE, qui s’appuie sur des campagnes de valorisation de transit¹, est d’observer et de comprendre les variabilités saisonnières de la pression partielle du CO_2 et du C_T dans les eaux de surface, et cela en association avec des mesures hydrologiques et biogéochimiques *in situ* avec l’aide de données *sat* (température, couleur de la mer, etc.).

Les parcours logistiques des navires permettent d’accéder à des zones très peu étudiées et de les documenter afin de comprendre les processus qui expliquent les variations spatiotemporelles de la pression partielle du CO_2 à moyenne échelle dans les régions océaniques australes. Les données récoltées durant ces campagnes servent de base pour faire des estimations de la variabilité inter-annuelle et de la variation moyenne (tendance) du flux net de CO_2 à l’interface océan-atmosphère.

En identifiant et en quantifiant des sources et puits de CO_2 , les observations recueillies lors des campagnes MINERVE servent également à d’autres équipes pour contraindre des modèles atmosphériques, mais aussi valider des modèles biogéochimiques basés sur la circulation générale océanique² (Goyet (2013), MINERVE, <http://caraus.ipsl.jussieu.fr/>). Plusieurs travaux scientifiques basés sur la mission MINERVE ont été publiés dans des revues internationales et présentés lors de colloques internationaux ou nationaux tel que Breviere (2005); Aït-Ameur et Goyet (2006); Laika (2008); Aït-Ameur (2007) et Laika *et al.* (2009).

MINERVE s’effectue à bord du navire *L’ASTROLABE* et qui s’articule sur cinq rotations (de R0 à R4). Le fait que les deux rotations R1 et R3 ne sont disponibles qu’en moyenne d’une année sur cinq et que les autres rotations couvrent quasiment la période du printemps à l’été austral (et sont disponibles chaque année, ou du moins sur toute la période étudiée), le travail de cette thèse s’est donc fait sur la base des trois rotation R0, R2 et R4; ce choix nous a permis d’étudier l’ensemble de cette période, et ainsi, le comportement des paramètres du printemps à l’été austral.

Chronologiquement parlant, nous avons eu accès à une partie des données (entre 2002 et 2008) pendant la première année de thèse et c’est sur ces données là que le premier article a été écrit(en combinaison avec les données d’IMOS (section 2.1.1.3); Benallal *et al.* (2016a)).

1. Donner plusieurs aspects à une traversée en mer y compris celui de la recherche scientifique.
2. Qui tentent de simuler le cycle du carbone océanique à moyen et à long terme.

La figure 2.1 présente la distribution quantitative des données suivant les trois rotations, la figure 2.2 présente la distribution temporelle de ces données et le tableau 2.1 donne un aperçu des données récoltées en mer et dont on a pu avoir accès. En avril 2016, j'ai pu avoir accès à une nouvelle base de données que nous appellerons MINERVE_2 et qui donnait la fCO_2^{eau} mesurée et calibrée pour quelques rotations (R0 pour 2005/2006, R2 pour 2004/2005 et 2006/2007 et R4 pour 2004/2005). Nous verrons par la suite ce que nous avons fait avec cette base.

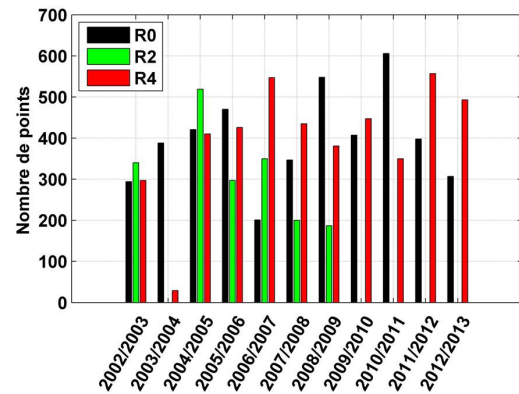


FIGURE 2.1 – Distribution quantitative des données MINERVE.

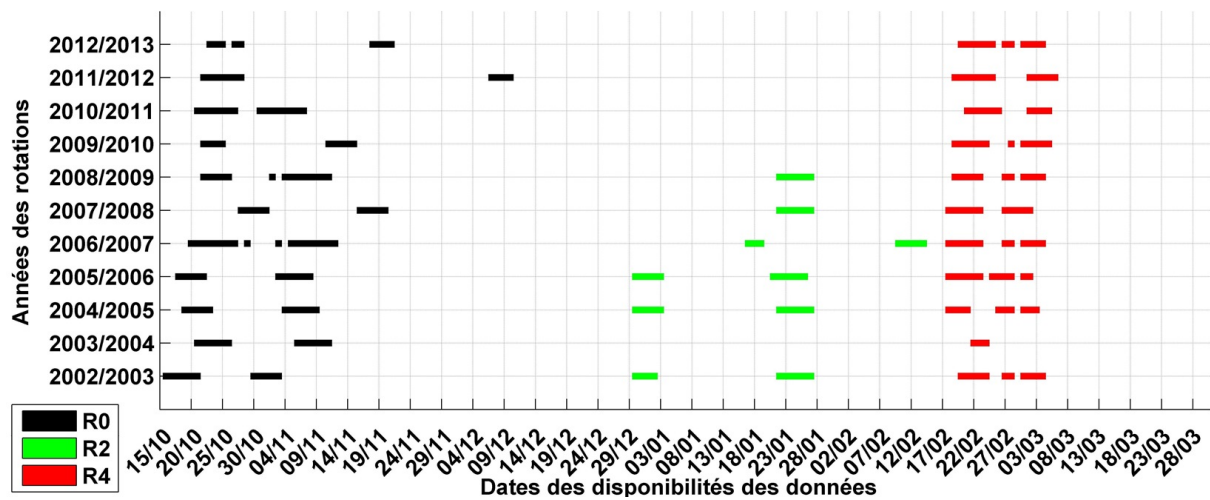


FIGURE 2.2 – Distribution temporelle des données MINERVE.

Données Disponible	Unité
Température	°C
Salinité	Sans Unité
Alcalinité Totale	$\mu\text{mol.kg}^{-1}$
Carbone Total Inorganique Dissous	$\mu\text{mol.kg}^{-1}$
pH	Sans Unité

TABEAU 2.1 – Récapitulatif des données disponibles pour la mission MINERVE

2.1.1.2 Le projet SURVOSTRAL

Le programme SURVOSTRAL (SURveillance de l'Océan AuSTRAL) fait partie intégrante du programme international de l'océan sud CLIVAR (Climate and Ocean - Variability, Predictability, and Change, <http://www.clivar.org/>). SURVOSTRAL est une initiative de recherche conjointe entre la France, l'Australie et les États-Unis d'Amérique, générant un des plus longs enregistrements continus du comportement de l'océan Austral. Ce programme est né d'un partenariat entre plusieurs institutions (<http://www.legos.obs-mip.fr/recherches/projets-en-cours/projet-survostral>) :

- L'IPEV qui prend en charge l'organisation administrative.
- Le LEGOS (Laboratoire d'Études en Géophysique et Océanographie Spatiales) qui est responsable de l'analyse et de la distribution des données du ThermoSalinoGraphe (TSG³) de surface.
- Le CSIRO qui fournit un soutien technique, y compris le développement de logiciels d'enregistrement et d'analyse des données.
- Le SIO (Scripps Institution of Oceanography) qui participe au développement des technologies d'observation des océans en profondeur et qui fournit des instruments pour le programme.

SURVOSTRAL est financé grâce à un accord de coopération entre l'IPEV, le PNEDC (Programme National d'Études Dynamique du Climat), le CSIRO et NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration).

Les scientifiques australiens et français ont mené un important programme d'observation des océans entre Hobart et la base antarctique française Dumont D'Urville depuis 1992. Le programme SURVOSTRAL leur fournit des informations de température et de salinité de la couche supérieure de l'océan. Ces données sont utilisées pour surveiller les variations climatiques et à la validation des simulations informatiques (modèles et projections pour l'océan Austral).

Pour cette thèse, je n'ai pu avoir accès à ces données qu'en Mars 2016. Ces données de température et de salinité (entre 2002/2003 et 2014/2015 pour les trois rotations) sont issues du TSG abord de L'ASTROLABE et donc sur les même trajets que la mission MINERVE. Lors de la réception des données SURVOSTRAL, nous avons été mis au courant que ces données ont été corrigées et calibrées. Sachant que toute les données MINERVE proviennent elles aussi du même TSG, nous nous sommes rendus compte qu'il y avait un biais sur la salinité initiale et celle après correction des données. Nous verrons en détails dans le chapitre suivant comment cela a affecté l'organisation de notre travail qui, jusqu'à mars 2016, s'est basé en partie sur les données de MINERVE. La figure 2.3 présente la distribution quantitative des données suivant les trois rotations et la figure 2.4 présente la distribution temporelle de ces données.

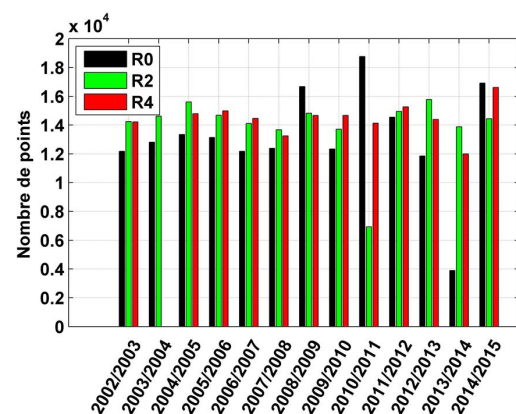


FIGURE 2.3 – Distribution quantitative des données SURVOSTRAL.

3. Appareil permettant de mesurer en continu la température et la salinité de surface de l'océan.

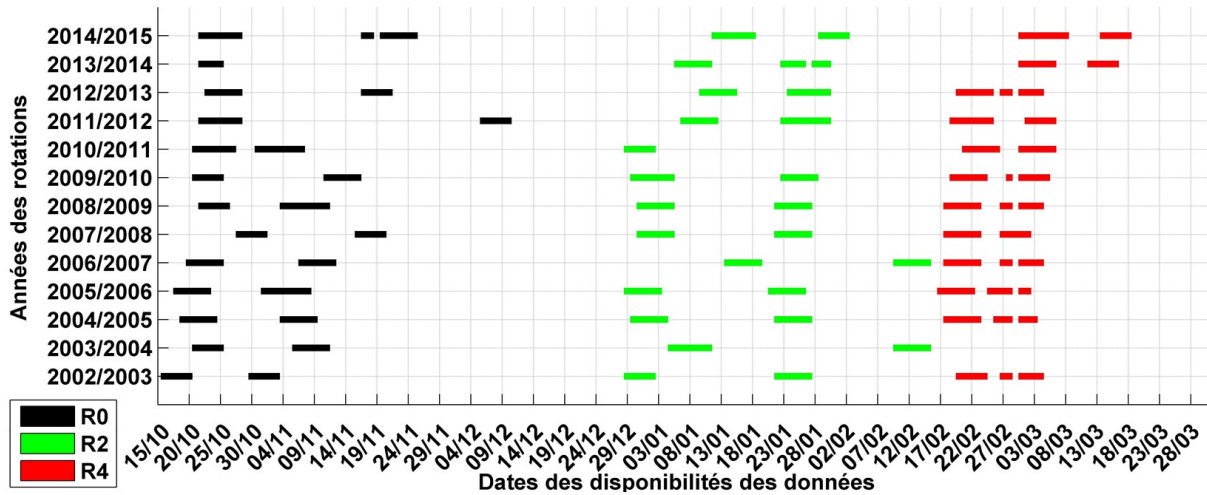


FIGURE 2.4 – Distribution temporelle des données SURVOSTRAL.

2.1.1.3 Le projet IMOS

Depuis 2006, IMOS (Integrated Marine Observing System) exploite une large gamme d'équipements pour l'observation des zones côtières et des océans autour du continent australien pour produire des données accessibles à la communauté scientifique. IMOS fonctionne comme une collaboration multi-institutionnelle⁴, il s'intéresse à cinq grands thèmes de recherche qui unifient plans scientifiques et observations connexes :

- Les changements multi-décennaux de l'océan.
- La variabilité climatique et les phénomènes météorologiques extrêmes.
- Les principaux courants de côtes et les flux entre bassins.
- Le plateau continental et les processus côtiers.
- Les réactions de l'écosystème.

Les observations et les flux de données sont recueillis au moyen de dix plates-formes technologiques (ou équipements) :

- Les flotteurs Argo (<http://www.argo.ucsd.edu/>).
- La valorisation de transit (appelé SOOP pour Ships Of Opportunity).
- Les planeurs sous-marin (appelés Gliders) et les véhicules sous-marins autonomes.
- Les données recueillies par le réseau national australien d'amarrage de balises.
- Les radars fixes et les réseaux de capteurs sans fil.
- Le suivi des animaux marins.
- La télédétection par satellite.

4. IMOS est dirigé par *The University of Tasmania* en partenariat avec le *CSIRO* (the Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation), l'*Australian Institute of Marine Science*, le *Bureau of Meteorology*, l'*Australian Antarctic Division*, le *Geoscience Australia*, la *Sydney Institute of Marine Science* (qui comprend *the University of New South Wales*, *The University of Sydney*, *Macquarie University* et l'*University of Technology Sydney*), l'*University of Western Australia*, la *Curtin University*, la *James Cook University* et la *South Australian Research and Development Institute* (dans à propos, <http://imos.org.au/>)

La partie qui nous intéresse dans ce projet est celle des SOOP réalisés sur L'ASTROLABE sur le même trajet que le projet MINERVE. L'accès aux données n'a pu être possible qu'en début 2015 un peu avant le complément des données MINERVE. La figure 2.5 présente la distribution quantitative des données suivant les trois rotations, la figure 2.6 présente la distribution temporelle de ces données et le tableau 2.2 donne un aperçu des données récoltées en mer et dont on a pu avoir accès (Tilbrook *et al.*, 2013).

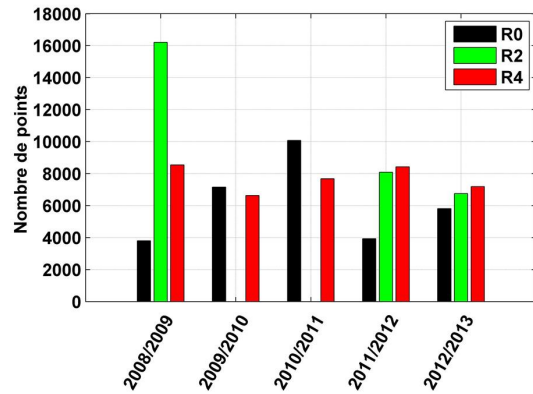


FIGURE 2.5 – Distribution quantitative des données IMOS.

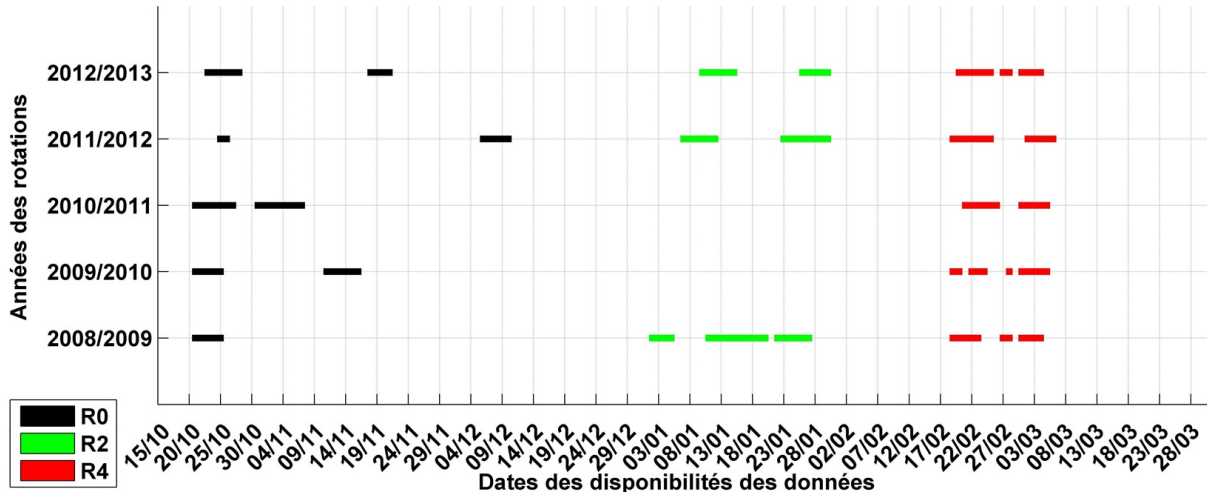


FIGURE 2.6 – Distribution temporelle des données IMOS.

Données Disponible	Unité
Température	°C
Salinité	Sans Unité
Fugacité du CO ₂ dans l'eau et dans l'air	μatm
Vitesse du vent	m.s ⁻¹
Direction du vent	degré (°)

TABLEAU 2.2 – Récapitulatif des données disponibles pour le projet IMOS

2.1.1.4 La station CAPE GRIM

Le programme de la station Cape Grim a été mis en place après l'engagement pris par le gouvernement australien dans le Programme des Nations Unies dans le début des années 1970. Ce dernier portait sur l'environnement et le changement climatique et avait pour but de surveiller et d'étudier la composition atmosphérique mondiale. En conséquence, la base de la station Cape Grim a commencé à mesurer la composition de l'atmosphère en Avril 1976 et a été en opération continue depuis cette date.

Cape Grim est sous la responsabilité conjointe du *Bureau of Meteorology* et du CSIRO. Le *Bureau of Meteorology* exploite l'installation d'observations atmosphériques de Cape Grim (les fonds et la mise en place) et le CSIRO analyse et modélise les données résultantes qui, sont ensuite mises à la disposition des parties intéressées ; les organismes gouvernementaux, l'industrie australienne, le public et les organismes internationaux.

Depuis les premiers échantillonnages à Cape Grim, plus de 3 milliards de mesures ont été acquises. Parmi celles-ci, des mesures de gaz à effet de serre (GES), dont le dioxyde de carbone (le CO_2 qui nous intéresse), le méthane (CH_4), l'oxyde nitreux (N_2O) et les GES synthétiques tels que les hydro-fluoro-carbures (HFCs), les hydrocarbures perfluorés (PFCs) et l'hexafluorure de soufre (SF_6). La station Cape Grim est positionnée juste au sud de la pointe nord-ouest de la Tasmanie ($40,683^\circ\text{S}$, $144,689^\circ\text{E}$, figure 1.4). Cette localisation est très importante ; l'échantillon d'air prélevé à Cape Grim arrive après de longues trajectoires à travers l'océan Austral, dans des conditions décrites comme *de base* (il n'y a pas de villes ou industries à proximité qui contamineraient l'air), cet air de référence est représentatif d'une vaste zone de l'hémisphère sud, non affecté par les sources de pollution régionales (Cape Grim Greenhouse Gas Data, greenhouse-gases, <http://www.csiro.au/>).

Les concentrations de dioxyde de carbone dans l'air sont mesurées en utilisant des analyseurs de gaz infrarouge non dispersif (NDIR : Non-Dispersive Infrared gas analysers). Ces instruments peuvent détecter la concentration de dioxyde de carbone en mesurant la quantité de rayonnement infrarouge absorbée par un échantillon d'air par rapport à un échantillon d'air de référence (Murphy *et al.*, 1998).

Les données publiées de la station Cape Grim sont disponibles en ligne à raison d'une valeur moyenne par mois (Cape Grim Greenhouse Gas Data, greenhouse-gases, <http://www.csiro.au/>). La figure 2.7.a présente les données utilisées lors de nos travaux, on remarque bien la croissance quasi-linéaire du niveau du CO_2 atmosphérique au fil des années ; néanmoins, il faut préciser que la tendance est exponentielle depuis l'air industrielle (figure 2.7.b).

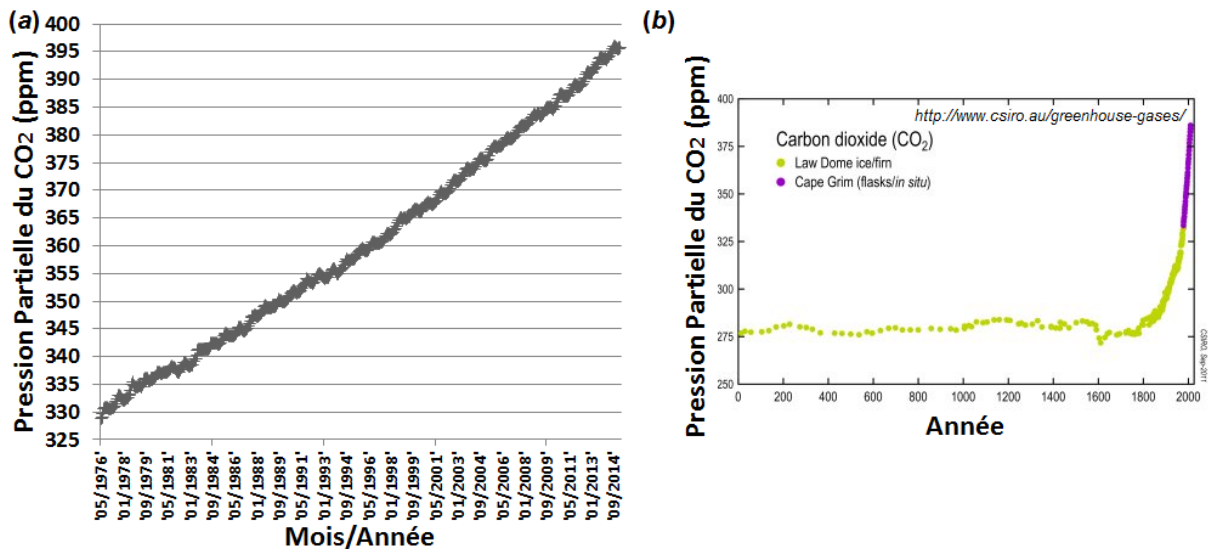


FIGURE 2.7 – Données de pression partielle du CO₂ collectées par la station Cape Grim : (a) : enregistrement depuis 1976, (b) : enregistrement depuis l’aire pré-industrielle (<http://www.csiro.au/greenhouse-gases/>).

2.1.2 Analyse des données *in situ*

Nous commençons par analyser la distribution spatiotemporelle de ces données. Chaque programme donnant différents paramètres, nous utiliserons lors de notre analyse :

- La température et la salinité de SURVOSTRAL. Ayant déjà fait cette analyse avec les données MINERVE (données biaisées), nous avons dû la refaire avec les données SURVOSTRAL car celles-ci sont les données corrigées du TSG (à noter que la température et la salinité de MINERVE sont initialement tirées des données SURVOSTRAL). En plus d’être calibrées, ces données sont spatio-temporellement plus complètes.
- L’ A_T et le C_T en utilisant les données MINERVE. Ces deux paramètres sont mesurés à bord toutes les 20 min, d’autres échantillons sont aussi prélevés puis analysés en laboratoire pour vérification.
- La fCO_2^{au} , la fCO_2^{air} et la vitesse du vent en utilisant les données IMOS. Ce programme est le seul à nous fournir des données de fugacité du CO₂ à surface de l’eau en continu.

La figure 2.8 présente la distribution spatiale des traversées de L’Astrolabe ; nous avons utilisé les données SURVOSTRAL pour tracer ces trajets car elles couvrent toute la période étudiée.

Le trajet des missions à bord de L’Astrolabe part du port d’Hobart en Tasmanie (42,88°S, 147,33°E) en Australie pour arriver à la base scientifique française de Dumont D’Urville en Terre-Adélie (66,66°S, 140,00°E), on parle alors de *radiale* Hobart-DDU, celle-ci faisant environ 2700 km. Ce que l’on remarque c’est que le trajet est quasiment le même à chaque traversée sauf pour certaines où le bateau a dû se rendre à l’Île Macquarie (soit pour un ravitaillement de l’île, soit pour le débarquement de personnels ou bien pour se protéger des tempêtes).

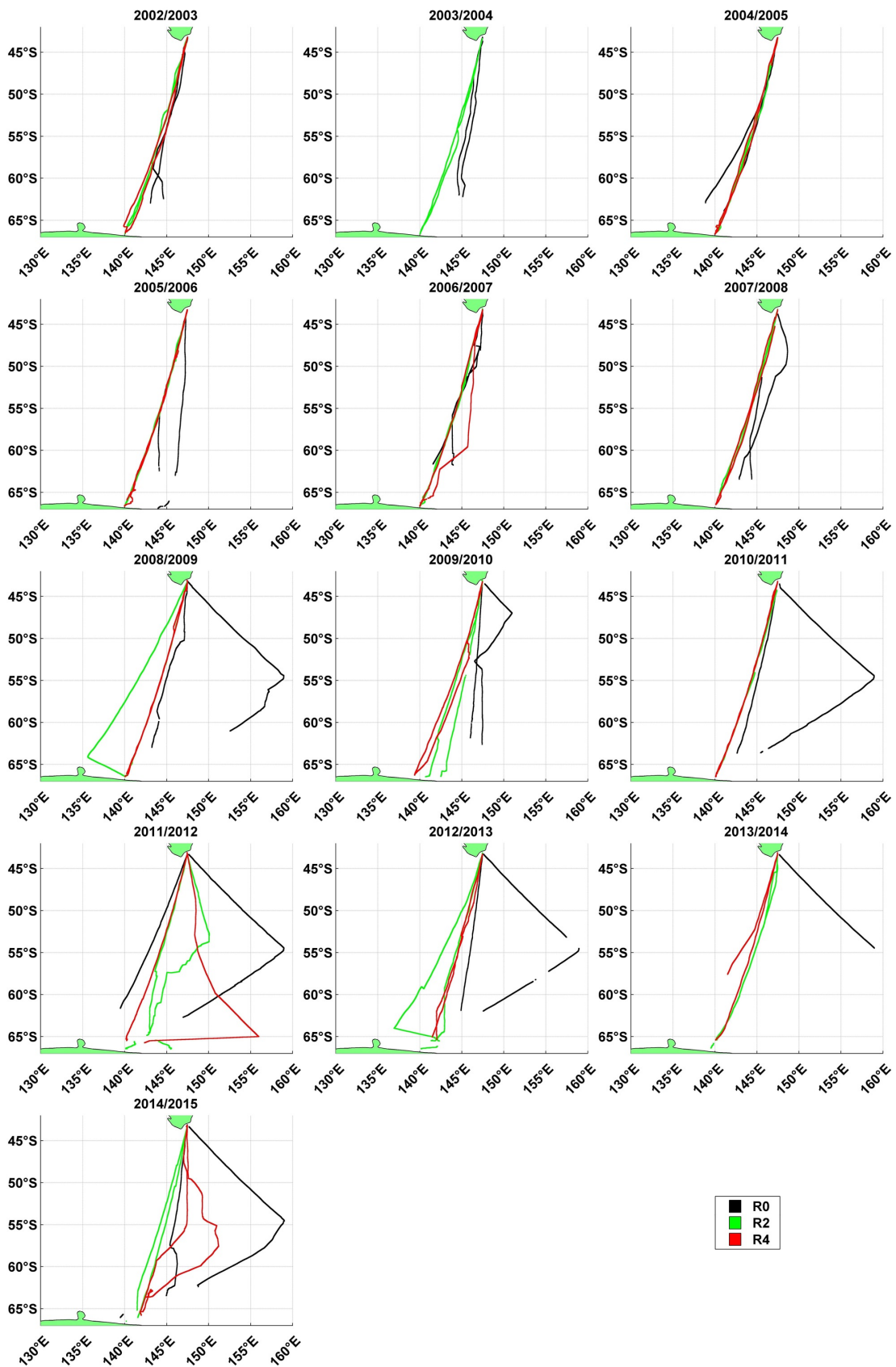


FIGURE 2.8 – Trajets de L'Astrolabe entre 2002/2003 et 2014/2015 pour les trois rotation R0, R2 et R4.

2.1.2.1 La température

La température (SST pour Sea Surface Temperature) *in situ* est disponible toutes les années (2002 à 2015) tout le long de la période du printemps à l'été austral (d'octobre à mars). Dans la figure 2.9, on remarque que la SST minimum est d'environ -2°C tout le long de la période mais que la valeur maximale part de 15°C au printemps austral (Vers Octobre) pour atteindre les 18°C en milieu de période (Janvier) et enfin dépasser les 19°C dans l'été austral. Si l'on regarde plus précisément, pour R0 la pente générale est d'environ $0,80^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, le front polaire (PF) vient diviser cette pente en deux : la partie au nord du front ($\sim >54,4^{\circ}\text{S}$) a une pente de $\sim 0,87^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ alors que celle au sud est de $\sim 0,48^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, néanmoins, si l'on prend la SAR, on remarque trois pentes bien distinctes, l'une correspondant à la PFZ à $1,61^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, la deuxième à la SAZ à $0,64^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et la troisième pour la STZ à $0,85^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$. Pour R2 la pente générale est de $0,69^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, dû à la différence entre celles au nord et au sud du front à respectivement $\sim 1,04^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et $0,45^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, la partie au nord du front polaire est elle aussi échelonnée en trois parties; les zones (dans l'ordre du nord au sud) STZ, SAZ et PFZ ont respectivement une pente de $1,17^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, $0,70^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et $1,23^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, ce qui a pour cause de donner l'aspect en escalier à la distribution. Pour R4 la pente générale est de $0,72^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, on remarque encore plus dans ce cas l'effet des différents fronts; nous avons comme pour R2 un effet d'escalier avec une SST qui baisse du nord au sud dans la SAR avec trois pentes pour la STZ, la SAZ et la PFZ respectivement à $1,18^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, $0,79^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et $1,25^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$, par contre, dans l'AR deux phénomènes sont perceptibles; la quasi-totalité de la POOZ a une légère pente de $0,26^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ qui s'amplifie dans SFZ à $0,51^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et par la suite, une chute de la SST à l'approche de la banquise avec un pente à $0,76^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$. La

différence entre la SAR et l'AR est la plus perceptible en R4 avec une pente respective de $1,07^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$ et $0,46^{\circ}\text{C}\cdot^{\circ}\text{S}^{-1}$. Toutes les équations en détails sont présentées dans l'annexe B.1.

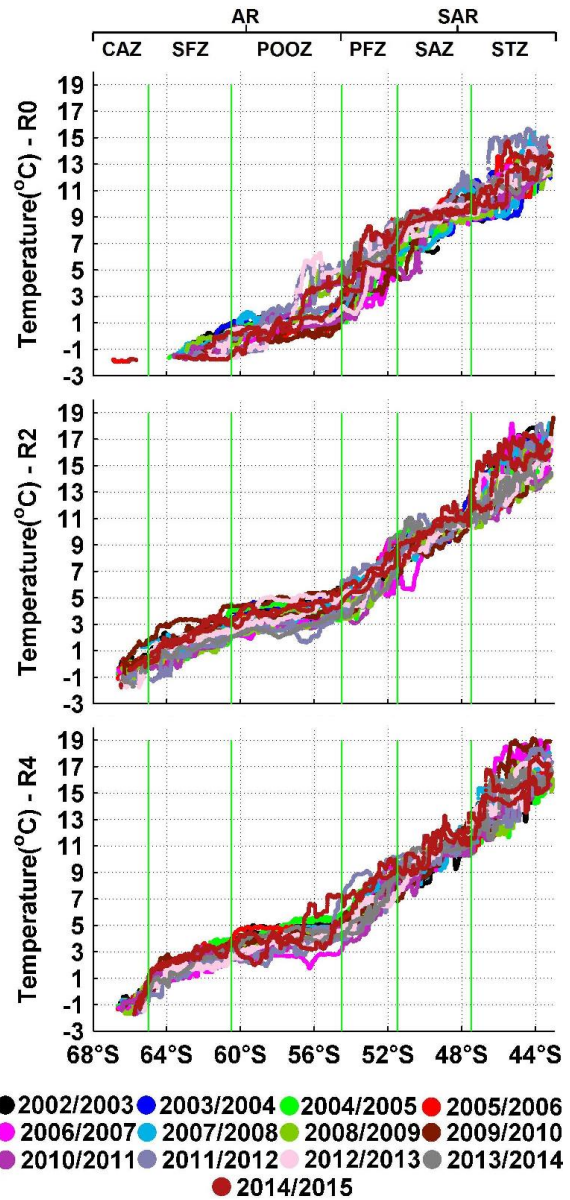


FIGURE 2.9 – Distribution latitudinale de la température *in situ*.

Si l'on étudie la variabilité interannuelle de la SST (Figure 2.10), on remarque que celle-ci, de 2002 à 2013, ne fait qu'augmenter chaque année avec une pente générale (R0+R2+R4) de $\sim 0,05^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ soit une augmentation générale de $\sim 0,6^{\circ}\text{C}$ en douze ans le long de la radiale Hobart-DDU.

Cette augmentation est dû à la SAR qui a une pente de $0.09^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ alors que l'AR diminue au fil des années avec une pente de $-0.02^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$; ceci veut dire que l'océan au nord et au sud du front polaire se comporte différemment; avec des eaux qui deviennent plus chaudes vers le continent australien et des eaux qui se refroidissent (mais de façon plus légère) du côté de la banquise. Plus précisément, cette augmentation touche R0 et R4 une pente respective de $\sim 0,13^{\circ}\text{C}$ et $\sim 0,06^{\circ}\text{C}$ alors que pour R2, c'est plutôt une très légère diminution avec une pente de $-0.01^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$.

Pour la SAR, on remarque une augmentation de d'ordre de $0,10^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$, $0,04^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ et $0,06^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ respectivement pour R0, R2 et R4, alors que pour l'AR, c'est une augmentation de l'ordre de $0,04^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ pour R0 en face d'une diminution de l'ordre de $-0,06^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ et $-0,002^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ respectivement pour R2 et R4.

C'est donc à partir du mois de janvier que les eaux au sud du front polaire commence à se refroidir alors que toute la période est en général marquée par une augmentation continue de la SST.

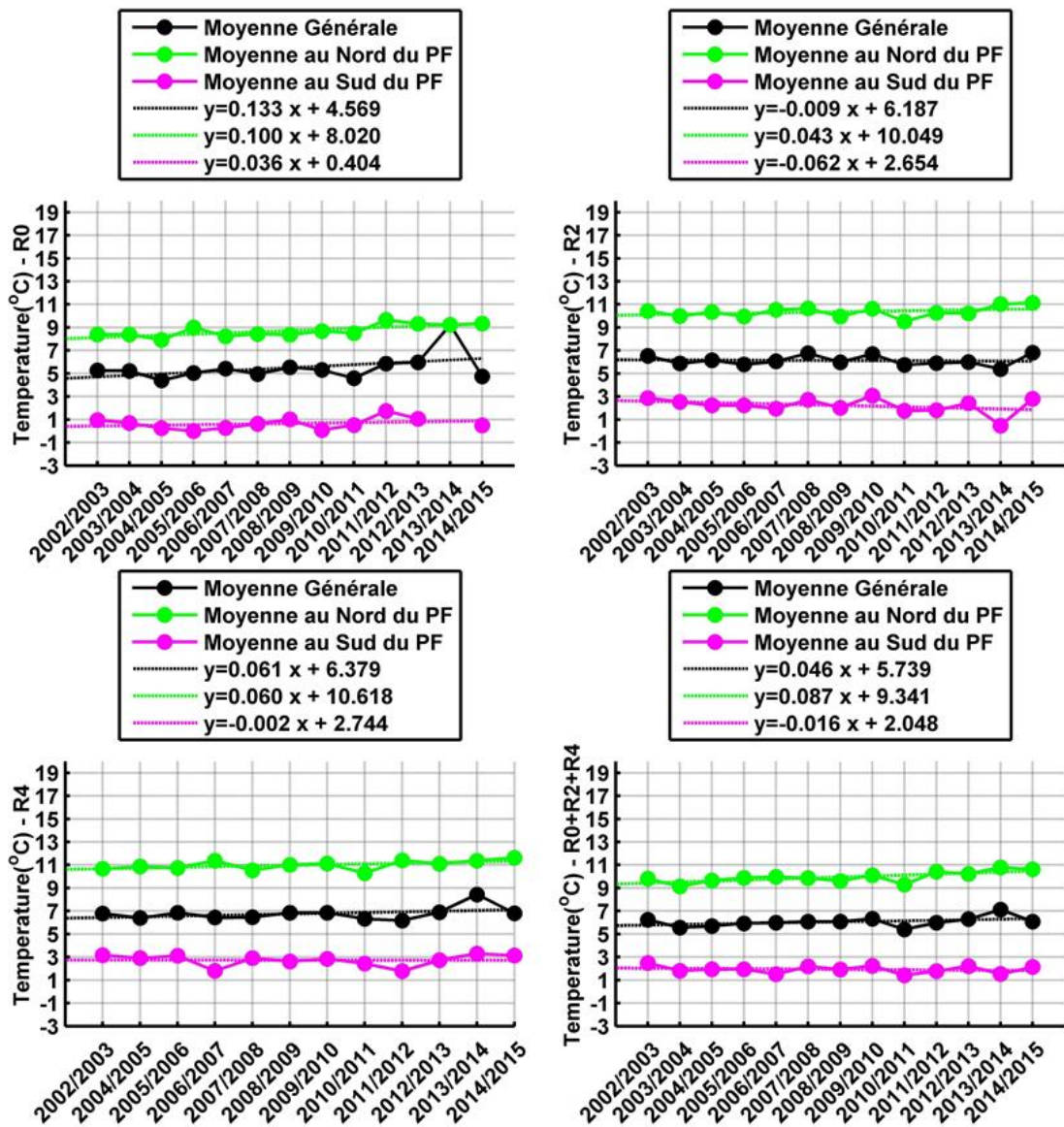


FIGURE 2.10 – Variabilité interannuelle de la température pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.2 La salinité

La salinité⁵ (SSS pour Sea Surface Salinity) *in situ* est disponible toutes les années de 2002/2003 à 2014/2015 tout le long de la période d'octobre à mars par le programme SURVOSTRAL (pour rappel, après réception des données calibrées, cette analyse a été mise à jour). Dans la figure 2.11, on remarque que la SSS tourne autour d'un maximum de ~ 35.5 aux côtes de la Tasmanie et diminue de façon régulière jusqu'au PF où une stabilisation (très légère) se remarque autour des 33,80 pour R0 et $\sim 33,75$ pour R2 et R4. On note clairement aussi qu'en arrivant vers les hautes latitudes dans la CAZ la SSS oscille de façon franche entre ~ 33 et $\sim 34,50$; ceci est principalement dû au mélange d'eau de mer salée et de l'eau provenant de la fonte des glaces (eau plus douce). Toutes les équations en détails sont présentées dans l'annexe B.2. Contrairement à la SST, on remarque que la SSS n'est pas en constante diminution sur tout le trajet Hobart-DDU, elle a tendance à se stabiliser dans une même zone puis chuter aux niveaux des fronts. La pente générale pour R0, R2 et R4 est respectivement de $\sim 0,07^\circ\text{S}^{-1}$, $\sim 0,06^\circ\text{S}^{-1}$ et $\sim 0,06^\circ\text{S}^{-1}$, néanmoins, la différence de tendance au nord et au sud du PF est tellement grande qu'il est plus correct de parler de deux pentes pour chaque rotation; la première au nord du PF de $\sim 0,13^\circ\text{S}^{-1}$, $\sim 0,15^\circ\text{S}^{-1}$ et $\sim 0,15^\circ\text{S}^{-1}$ respectivement pour R0, R2 et R4, la deuxième au sud du PF et dans laquelle, comme cité précédemment, on remarque une légère pente représentant une augmentation de l'ordre de $\sim 0,01^\circ\text{S}^{-1}$ (du Nord au Sud) pour R0 et une baisse de la SSS (moins importante) pour R2 et R4 avec une pente respective de $\sim 0,001^\circ\text{S}^{-1}$ et $\sim 0,0005^\circ\text{S}^{-1}$. Arrivé à la banquise, nous ne pouvons parler de pente ou de tendance car la SSS est certes comprise dans un intervalle mais elle est aléatoire (nous verrons lors de la réalisation des modèles comment cela affecte les résultats).

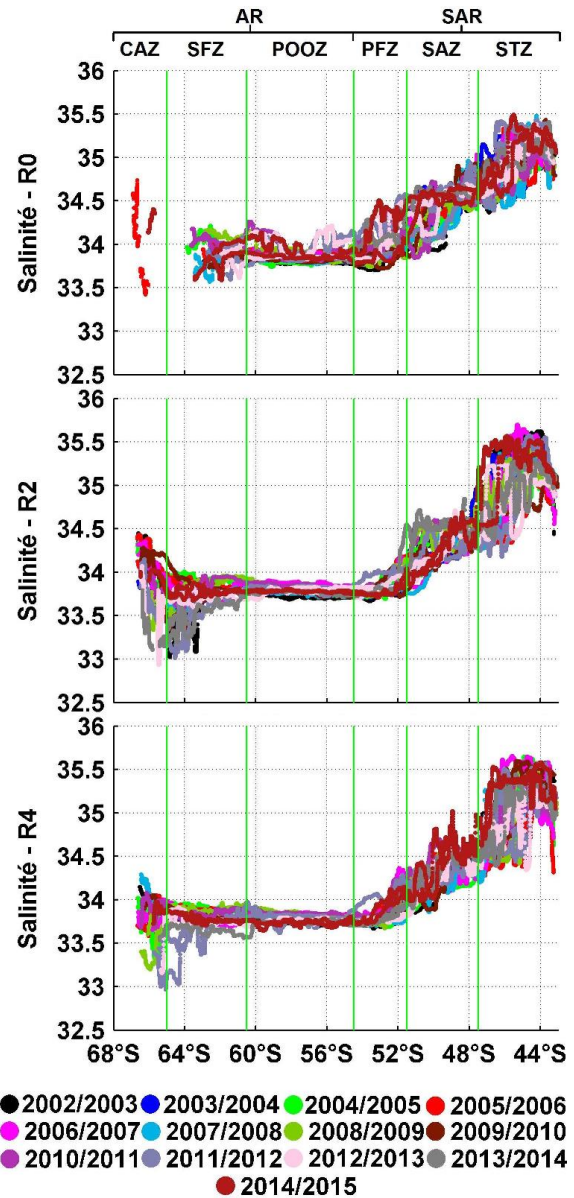


FIGURE 2.11 – Distribution latitudinale de la Salinité *in situ*.

Sur notre échelle de temps de treize années, la SSS tourne autour d'une valeur de $\sim 34,1$ (Figure 2.12), nous ne pouvons parler de pente même si celle-ci est de l'ordre de $\sim +0,003$.

5. À noter que la salinité n'a pas d'unité (IAPSO Working Group on Symbols, Units, and Nomenclature in Physical Oceanography., 1985).

Cette distribution interannuelle est causée par deux phénomènes correspondants à la SAR et l'AR où l'on remarque que, sur une moyenne générale pour l'été austral, l'océan au nord du PF a une SSS qui présente une tendance à la hausse de l'ordre de $0,01^{\circ}\text{S}^{-1}.\text{an}^{-1}$ alors que l'océan au sud du PF a une SSS qui est part à la baisse avec une pente de $\sim 0,006^{\circ}\text{S}^{-1}.\text{an}^{-1}$. Plus précisément, la légère hausse de SSS pour l'été austral est principalement dû à une hausse en R0 de l'ordre de $\sim 0,017^{\circ}\text{S}^{-1}.\text{an}^{-1}$ comparé à R4 qui est d'environ $0,004^{\circ}\text{S}^{-1}.\text{an}^{-1}$, et contrairement à R2 où l'on remarque une baisse d'environ $-0,0001^{\circ}\text{S}^{-1}.\text{an}^{-1}$. Une analyse comparable à celle-ci est présentée dans Morrow et Kestenare (2014); on remarque dans cette étude que la salinité suit la même distribution (à noter que toutes les données SURVOSTRAL ont été utilisées pour cette étude).

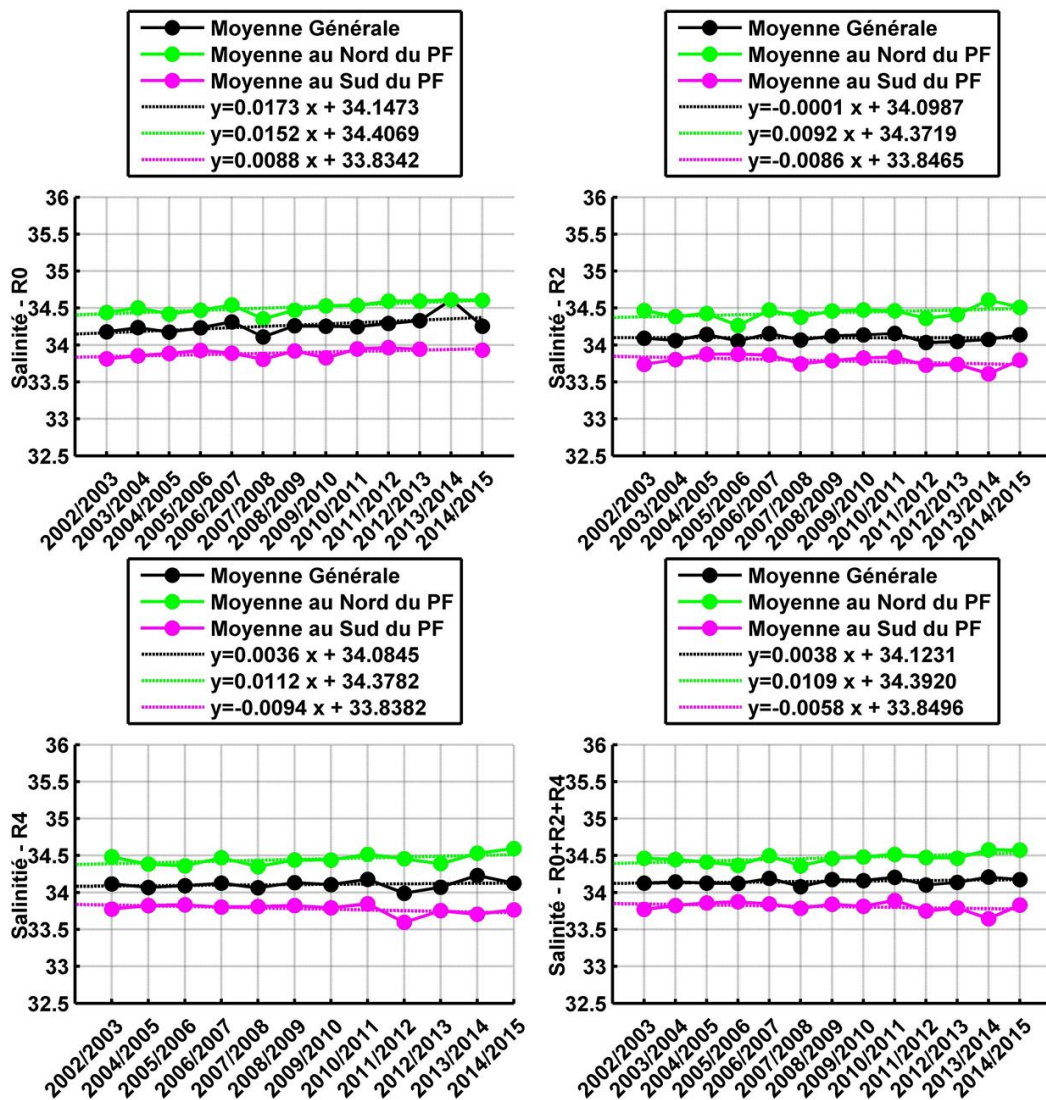


FIGURE 2.12 – Variabilité interannuelle de la salinité pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.3 L'alcalinité totale

L' A_T est disponible toute les années de 2002 à 2013 sauf exception (Figure 2.2). Exprimée en $\mu\text{mol.kg}^{-1}$, l'alcalinité totale suit une distribution latitudinale se rapprochant de la forme parabolique (Figure 2.13) avec un maximum de $\sim 2350 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ à l'approche de la Tasmanie et $\sim 2310 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ vers les côtes antarctiques, et avec un minimum moyen de $\sim 2250 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ au niveau du front polaire. Les équations en détails sont présentées dans l'annexe B.3.

On ne peut parler d'augmentation de l' A_T sur notre échelle de temps (de 2002 à 2013) tant celle-ci est de l'ordre de $\sim 0,12 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$ (Figure 2.14). Comme pour la SSS cette hausse est la plus importante en R0 (de l'ordre de $\sim 1,68 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$) comparée à R4 de l'ordre de $\sim 0,44 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$, et la baisse en R2 de $\sim -1,02 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$.

De façon générale, on remarque que l' A_T est plus élevée au nord du PF qu'au sud (sauf en 2002/2003), même si l'intervalle de différence entre les deux est d'environ ± 20 . Plus précisément, cette différence entre le nord et le sud est plus importante en R0 de 2003/2004 et en R4 de 2002/2003 et 2006/2007. Ceci est clairement visible dans les deux figures sur la variabilité de l' A_T (Figures 2.13 et 2.14).

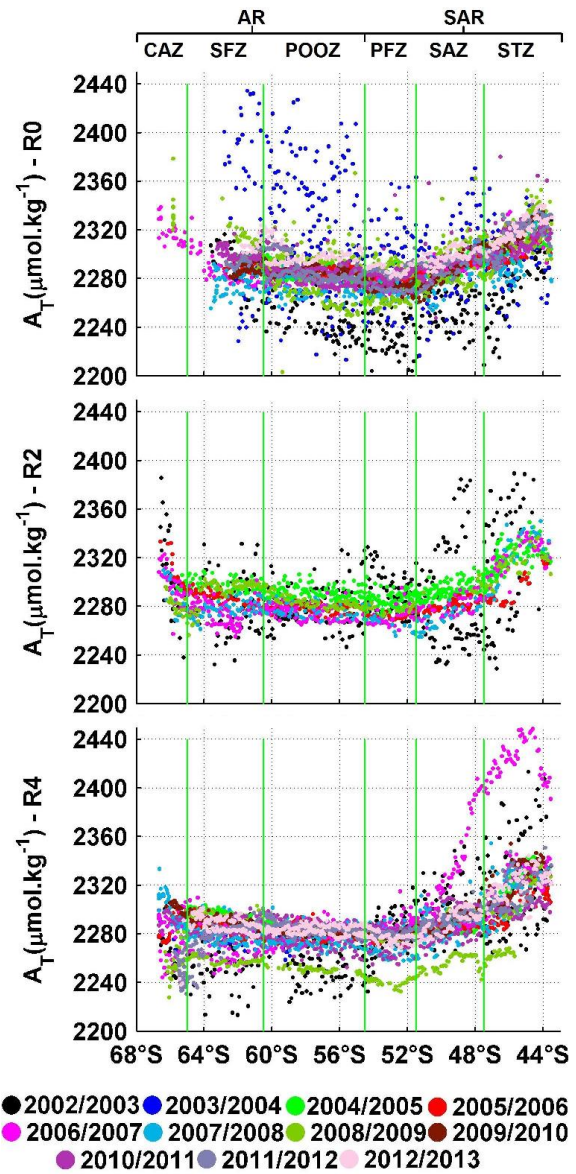


FIGURE 2.13 – Distribution latitudinale de l' A_T *in situ*.

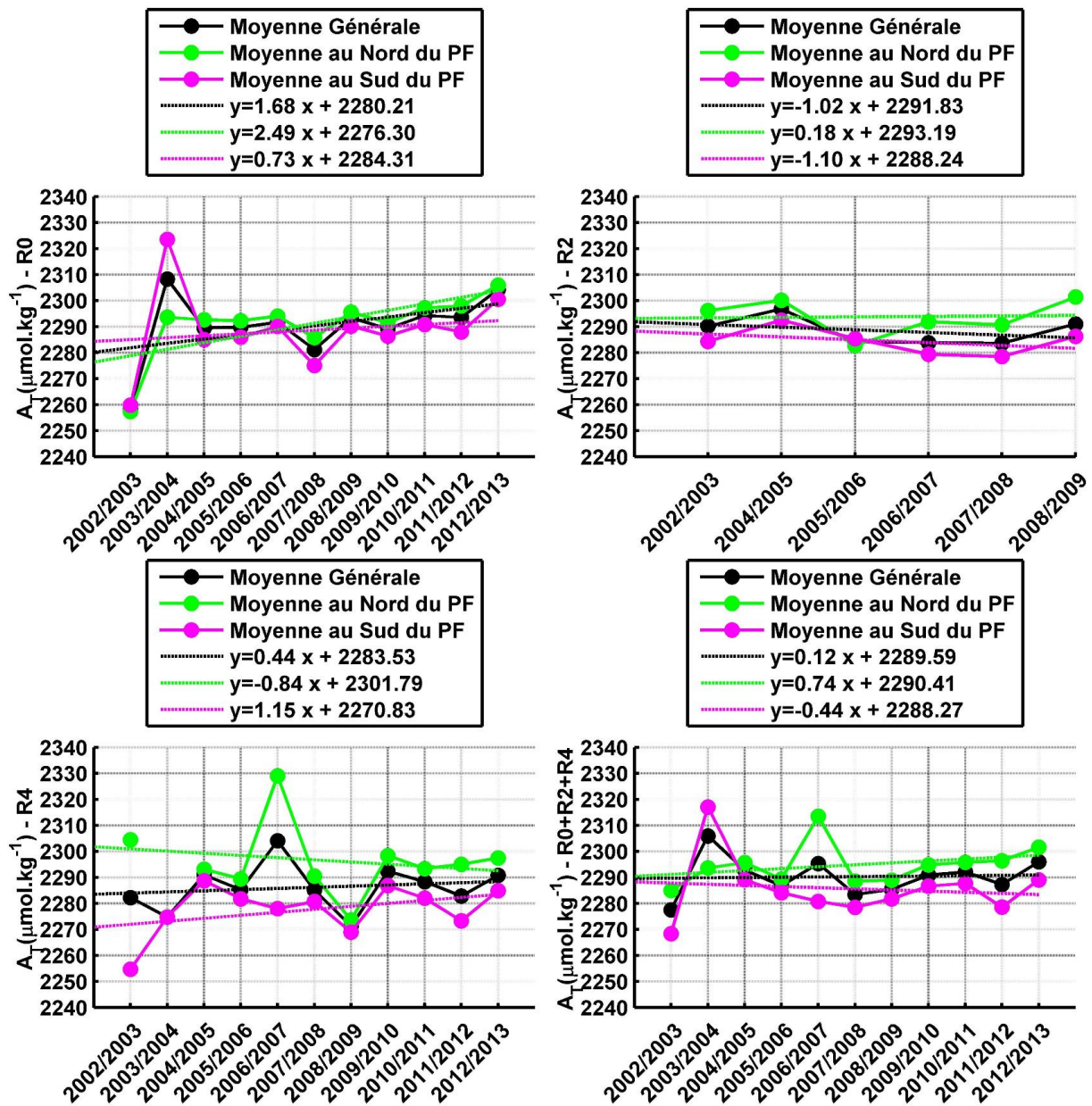


FIGURE 2.14 – Variabilité interannuelle de l' A_T pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.4 Le carbone inorganique dissous total

Le C_T est disponible toutes les années de 2002 à 2013 sauf exception (Figure 2.2). Exprimé en $\mu\text{mol.kg}^{-1}$, le carbone total suit une distribution latitudinale quasi-linéaire avec des valeurs minimales avoisinant les $\sim 2030 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ au nord et des valeurs maximales dans les $\sim 2190 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ à l'approche des côtes antarctiques. Nous avons une pente de $\sim -5,73 \mu\text{mol.kg}^{-1}$, $\sim -4,61 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ et $\sim -3,98 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ respectivement pour R0, R2 et R4. Les équations en détails sont présentées dans l'annexe B.4.

Sur notre échelle de temps (de 2002 à 2013), nous remarquons que le C_T tourne autour d'une valeur de $\sim 2125 \mu\text{mol.kg}^{-1}$; même si la pente est négative (soit une diminution), celle-ci reste très faible ($\sim -0,22 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$). Plus précisément, on remarque une augmentation en R0 ($\sim 0,30 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$) suivie d'une baisse en R2 ($\sim -1,64 \mu\text{mol.Kg}^{-1}.\text{an}^{-1}$) puis une augmentation en R4 ($\sim 0,50 \mu\text{mol.kg}^{-1}$).

Le comportement du C_T au nord et au sud du front polaire est en adéquation avec la moyenne générale (quand cette dernière augmente les deux moyennes au nord et au sud augmentent aussi et vis-versa), et ce, avec un C_T plus élevé au sud du PF qu'au nord de ce dernier, un intervalle d'environ $\pm 30 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ sépare les valeurs au nord de celles au sud.

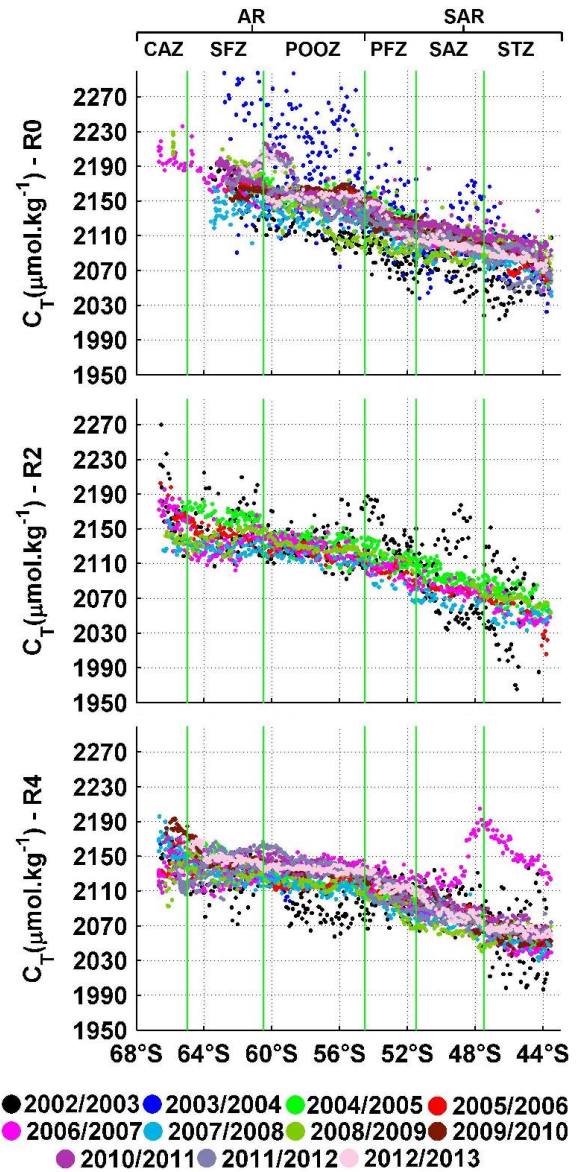


FIGURE 2.15 – Distribution latitudinale du C_T *in situ*.

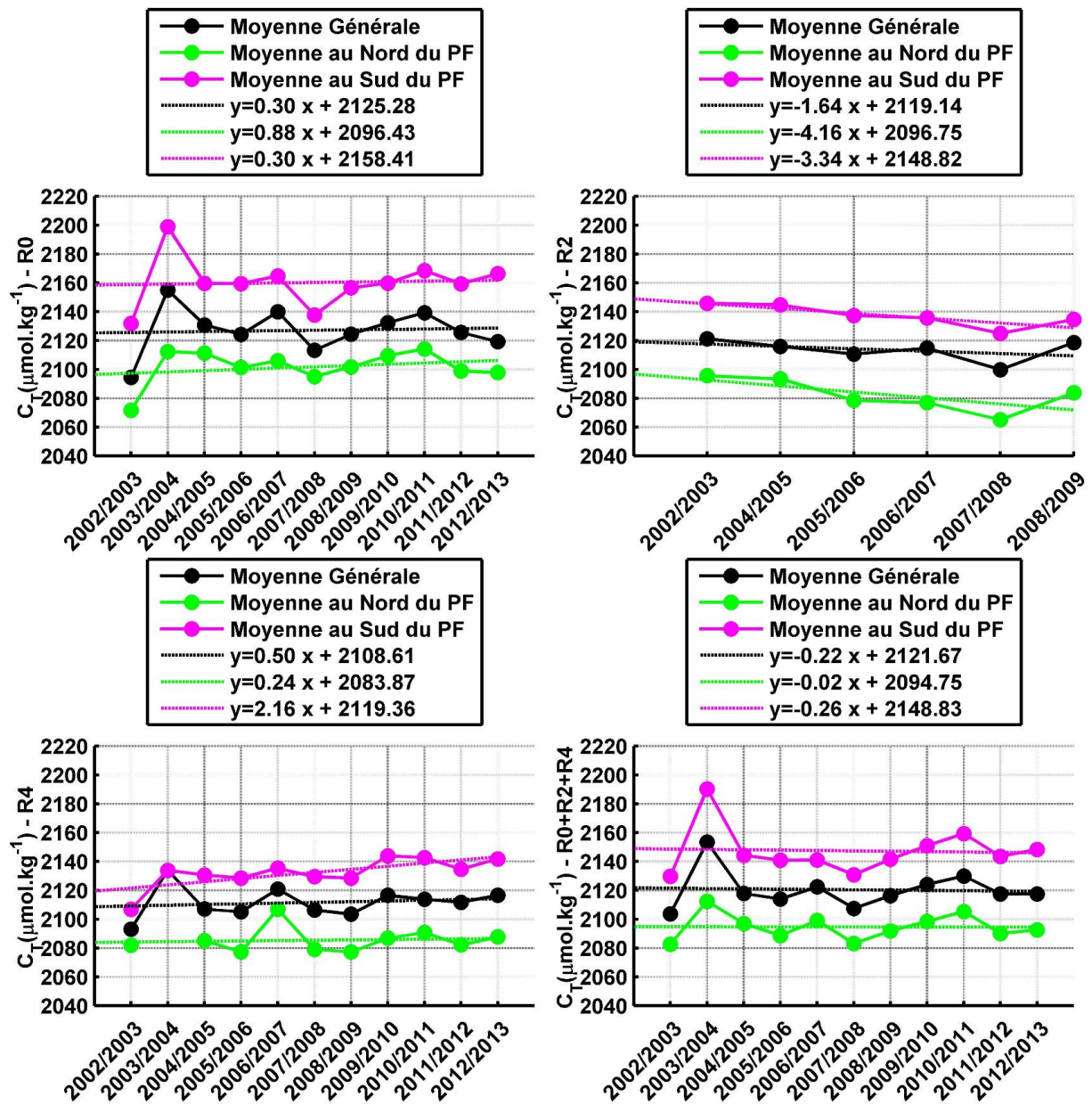


FIGURE 2.16 – Variabilité interannuelle du C_T pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.5 Le potentiel d'hydrogène

Le pH est disponible toutes les années de 2002 à 2013 sauf exception (Figure 2.2). Quelque soit la rotation, on remarque clairement dans la figure 2.17 que le pH diminue du nord au sud (l'eau est plus acide vers les côtes antarctiques qu'au nord) avec des valeurs maximales de $\sim 8,1$ et minimales de $\sim 7,75$ soit une pente respective de $\sim 0,01201$, $\sim 0,01033$ et $\sim 0,01004$ pour R0, R2 et R4. Toutes les équations en détails sont présentées dans l'annexe B.5. À noter que le calcul du pH en R0 de 2006/2007 à été biaisé et n'est donc pas pris en compte.

Si l'on regarde le comportement du pH à travers les années (Figure 2.18), on remarque bien l'acidification des eaux. En effet, pour chaque rotation, le pH diminue au fil des années avec une pente respective de $\sim -0,0021^{\circ}S^{-1}$, $\sim -0,0018^{\circ}S^{-1}$ et $\sim -0,0031^{\circ}S^{-1}$ pour R0, R2 et R4. On voit clairement que de 2002 à 2013, le pH diminue avec une pente générale de $\sim -0,0021 \text{ an}^{-1}$ en une dizaine d'années. Cette baisse touche toute la période étudiée ($\sim -0,0021 \text{ an}^{-1}$, $\sim -0,0018 \text{ an}^{-1}$ et $\sim -0,0031 \text{ an}^{-1}$ respectivement pour R0, R2 et R4).

Cette baisse est en concordance avec les recherches menées sur le pH , ainsi, on estime qu'en 250 ans, une baisse du pH global des océans est passé de 8,20 à 8,07 (Gattuso et Lavigne, 2009). (Dupont et Pörtner, 2013) rapporte que les eaux de surface ont subi une augmentation de l'acidification moyenne de l'ordre 30% depuis l'aire pré-industrielle. Les prévisions tend à dire qu'une diminution globale de $\sim -0,4$ unité est prévue pour la fin de ce siècle (Jacobson, 2005).

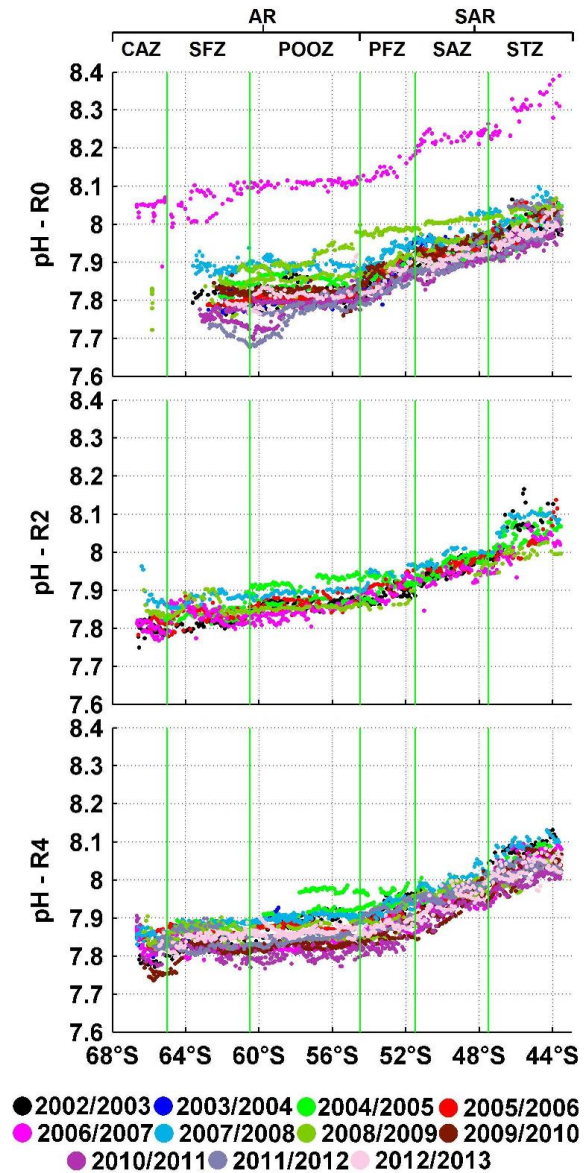


FIGURE 2.17 – Distribution latitudinale du pH *in situ*.

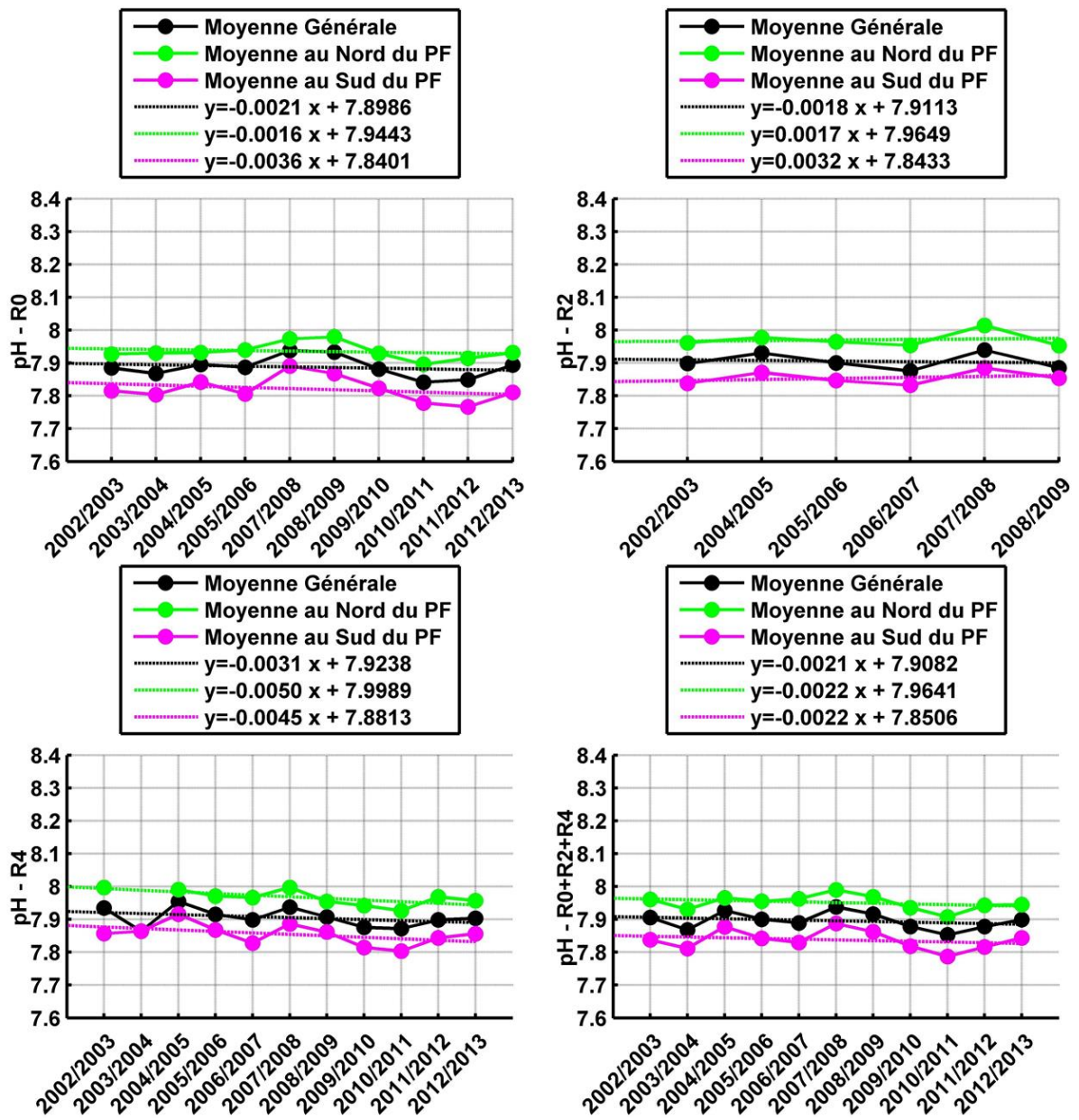


FIGURE 2.18 – Variabilité interannuelle du pH pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.6 La fugacité du CO₂ dans l'eau

la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ est disponible par le projet IMOS durant les campagnes de 2008/2009 à 2012/2013. Exprimée en μatm , la fugacité, comme cité précédemment nous informe sur la pression partielle du CO₂ dans l'eau de surface. La $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ suit une distribution latitudinale plus parabolique que linéaire (Figure 2.19); avec des valeurs qui diminuent à l'approche des côtes au nord (entre $\sim 310 \mu\text{atm}$ et $\sim 350 \mu\text{atm}$ dû à la consommation du CO₂ par l'activité biologique, ceci sera expliqué en détails dans le chapitre 4). Tout au sud, on remarque en R2 et R4 (car le bateau a pu aller jusque là) une tendance à la diminution mais une $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ qui oscille entre $\sim 190 \mu\text{atm}$ et $\sim 350 \mu\text{atm}$ pour R2 et $\sim 250 \mu\text{atm}$ à $\sim 360 \mu\text{atm}$ pour R4, cette variation importante est dû aux différents processus physiques et biologiques agissants au niveau des côtes antarctiques (Chapitre 1, figures 1.3 et 1.9), nous verrons par la suite lors de l'étude de la chlorophylle par satellite que l'activité biologique marine se situe en grande partie au nord et au sud de la région étudiée. Les équations des distributions latitudinales sont présentées en détails dans l'annexe B.7.

Pour chaque rotation, on remarque que d'une année à une autre, entre 2008/2009 et 2012/2013, la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ augmente (Figure 2.20) (cette augmentation est plus importante en R2 mais cela n'est basé que sur 3 années et une $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ plus faible au sud du PF en 2008/2009). On remarque sur cette échelle de cinq années que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ a augmenté passant d'une valeur moyenne de $\sim 324 \mu\text{atm}$ en 2008/2009 à $\sim 364 \mu\text{atm}$ en 2012/2013 soit une différence de $\sim 40 \mu\text{atm}$. Après modélisation et interpolation avec les données *sat* (Chapitre 4) nous verrons que cela concerne spécialement cette période, et que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ augmente et diminue sur toute l'échelle de temps entre 2002/2003 et 2014/2015.

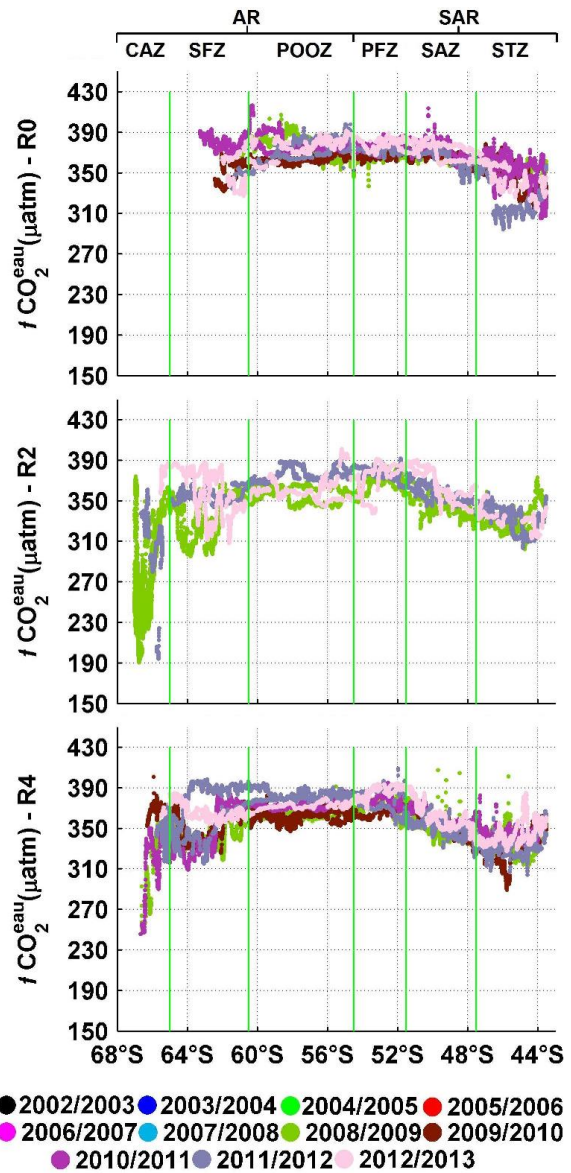


FIGURE 2.19 – Distribution latitudinale de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ *in situ*.

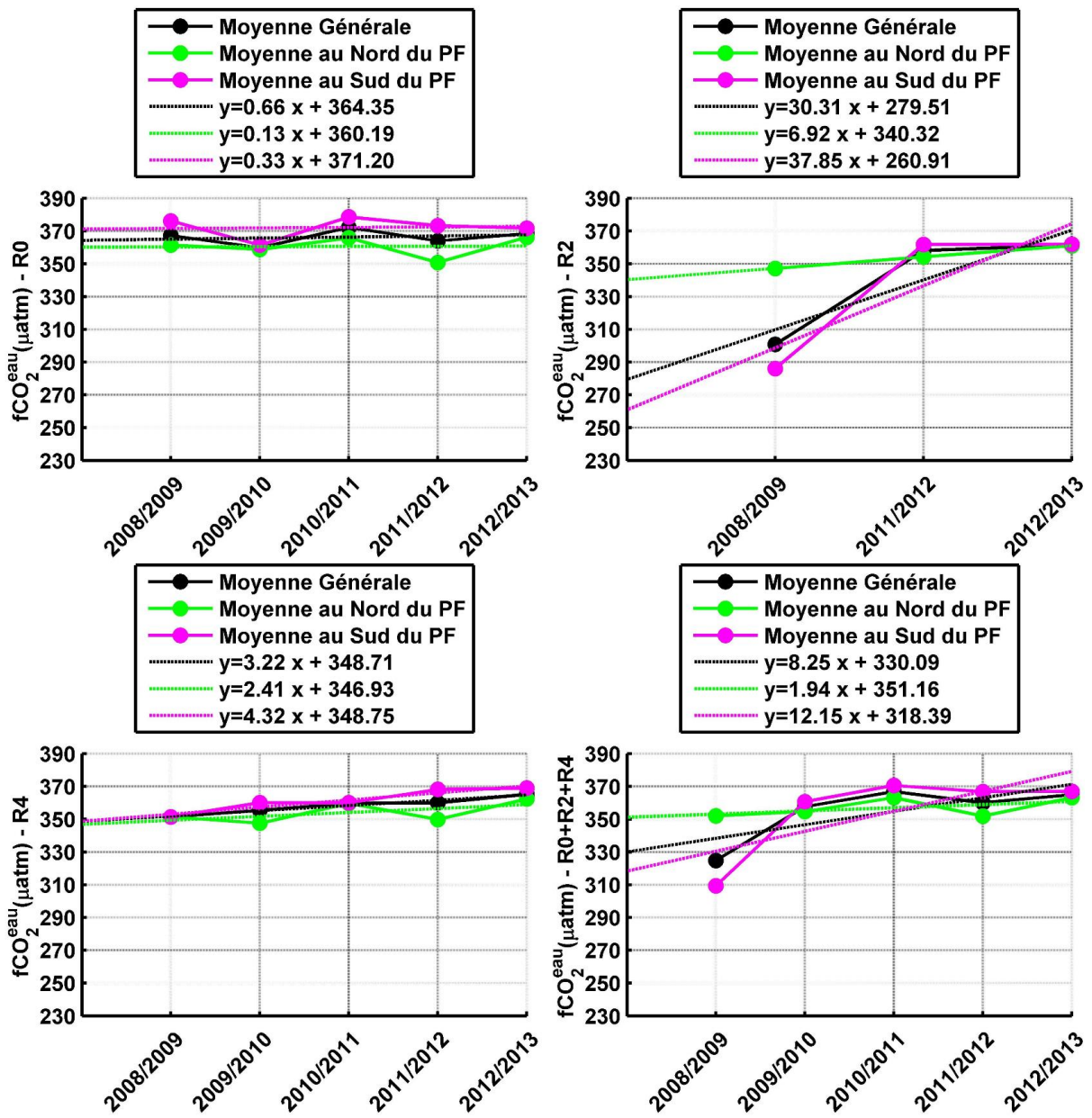


FIGURE 2.20 – Variabilité interannuelle de la fCO_2^{eau} pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.7 La fugacité du CO₂ dans l'air

La $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ *in situ* comme pour la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$, est disponible de 2008/2009 à 2012/2013. Même s'il y a une différence entre le nord et le sud de la région pour sa valeur, la $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ varie très peu, de l'ordre de $\sim 15 \mu\text{atm}$ pour R0, $\sim 8 \mu\text{atm}$ pour R2 et $\sim 14 \mu\text{atm}$ pour R4 (Figure 2.21). Les équations détaillées sont présentées dans l'annexe B.6.

On remarque que dans une même saison, la $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ est plus au moins stable sur la radiale Hobart-DDU, ceci dit, lorsqu'on regarde la variation inter-annuelle par rotation ou par campagne, et même sur une échelle temporelle réduite de 5 années, on remarque clairement l'augmentation du niveau de CO₂ dans l'air; d'une valeur moyenne de $\sim 370 \mu\text{atm}$ en 2008/2009, on est arrivé à plus de $\sim 380 \mu\text{atm}$ en 2012/2013 soit une augmentation annuelle d'environ $2 \mu\text{atm}\cdot\text{an}^{-1}$.

Ces données récoltées sur le bateau confirme bien les valeurs de pression partielle de CO₂ relevées par la station Cape Grim (Figure 2.7).

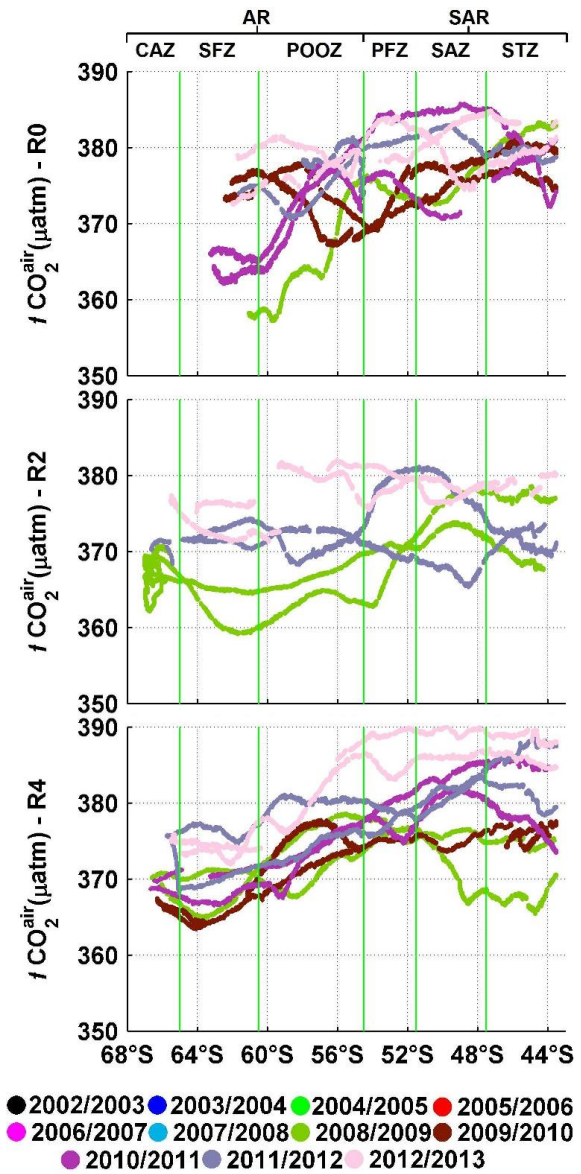


FIGURE 2.21 – Distribution latitudinale de la $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ *in situ*.

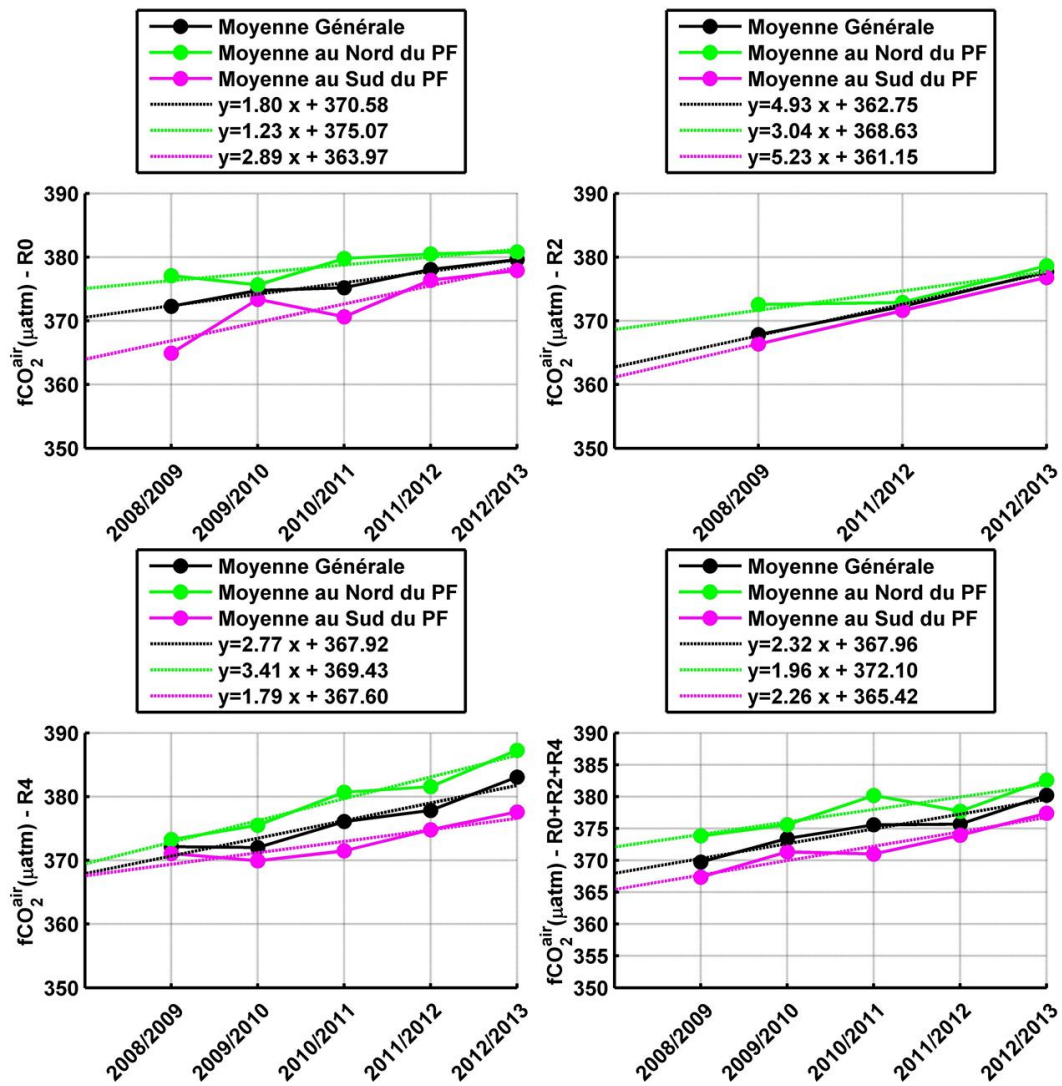


FIGURE 2.22 – Variabilité interannuelle de la fCO_2^{air} pour chaque rotation et pour la période complète (R0+R2+R4).

2.1.2.8 La vitesse du vent

La *VV in situ* est disponible depuis 2008/2009 par IMOS, la vitesse du vent est exprimé dans la figure 2.23 en m.s^{-1} (la *VV* est exprimé en nd (noeud) dans la base de données et a été convertie en m.s^{-1} avec la relation $1 \text{ nd} = 0.5144 \text{ m.s}^{-1}$ pour son utilisation future). À noter que l'on parle ici de vent réel et pas de vent apparent (par rapport à la vitesse du bateau).

Comme cité précédemment, le vent atteint des valeurs très élevées, de l'ordre de 23 m.s^{-1} (ou $\sim 82 \text{ km.h}^{-1}$). On remarque néanmoins que la *VV* est plus élevée en début de saison (R0) avec une moyenne aux alentours des 16 m.s^{-1} (ou $\sim 58 \text{ km.h}^{-1}$), et une moyenne en R2 et R4 de $\sim 10 \text{ m.s}^{-1}$ (ou $\sim 36 \text{ km.h}^{-1}$). Ces valeurs ne sont que des moyennes car en réalité, la *VV* peut dépasser les 30 m.s^{-1} ou $\sim 110 \text{ km.h}^{-1}$.

Le vent a une importance capitale dans le calcul du flux de CO_2 à l'interface air-mer (FCO_2) car, comme cité dans le premier chapitre, il sert à déterminer le coefficient de transfert k qui est directement lié à l'agitation de la couche de surface et donc au vent de surface. Nous verrons lors de nos expérimentations sur le calcul du FCO_2 l'effet du vent sur le paramètre k .

Il est à noter que d'année en année, on remarque une très légère baisse de la vitesse moyenne du vent, néanmoins, celle-ci reste assez faible et non significative vis à vis de l'échelle de temps de 5 ans.

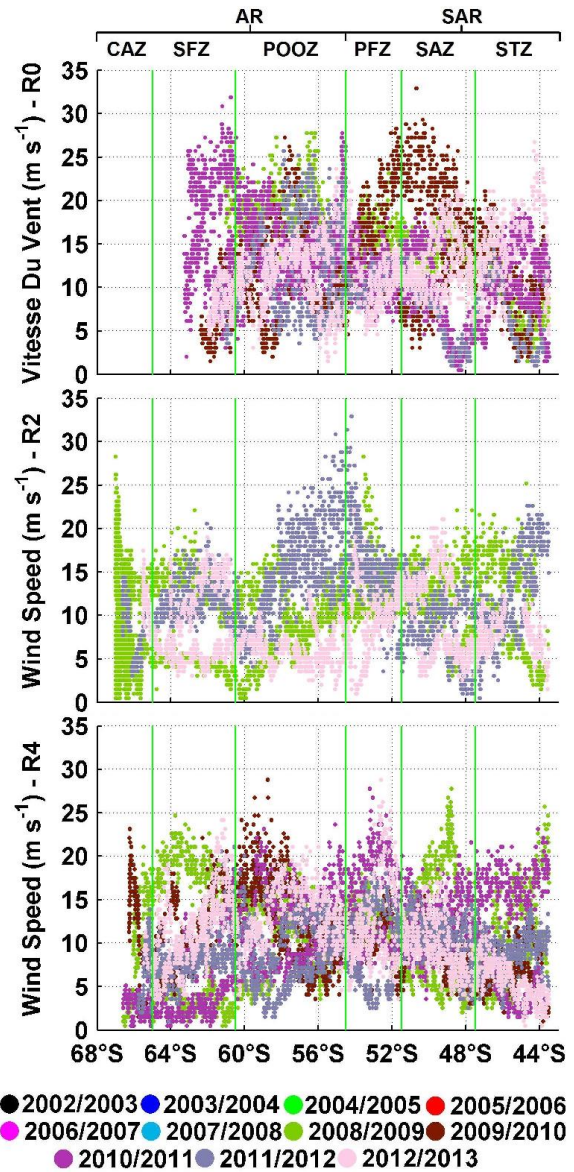


FIGURE 2.23 – Distribution latitudinale de la vitesse du vent *in situ*.

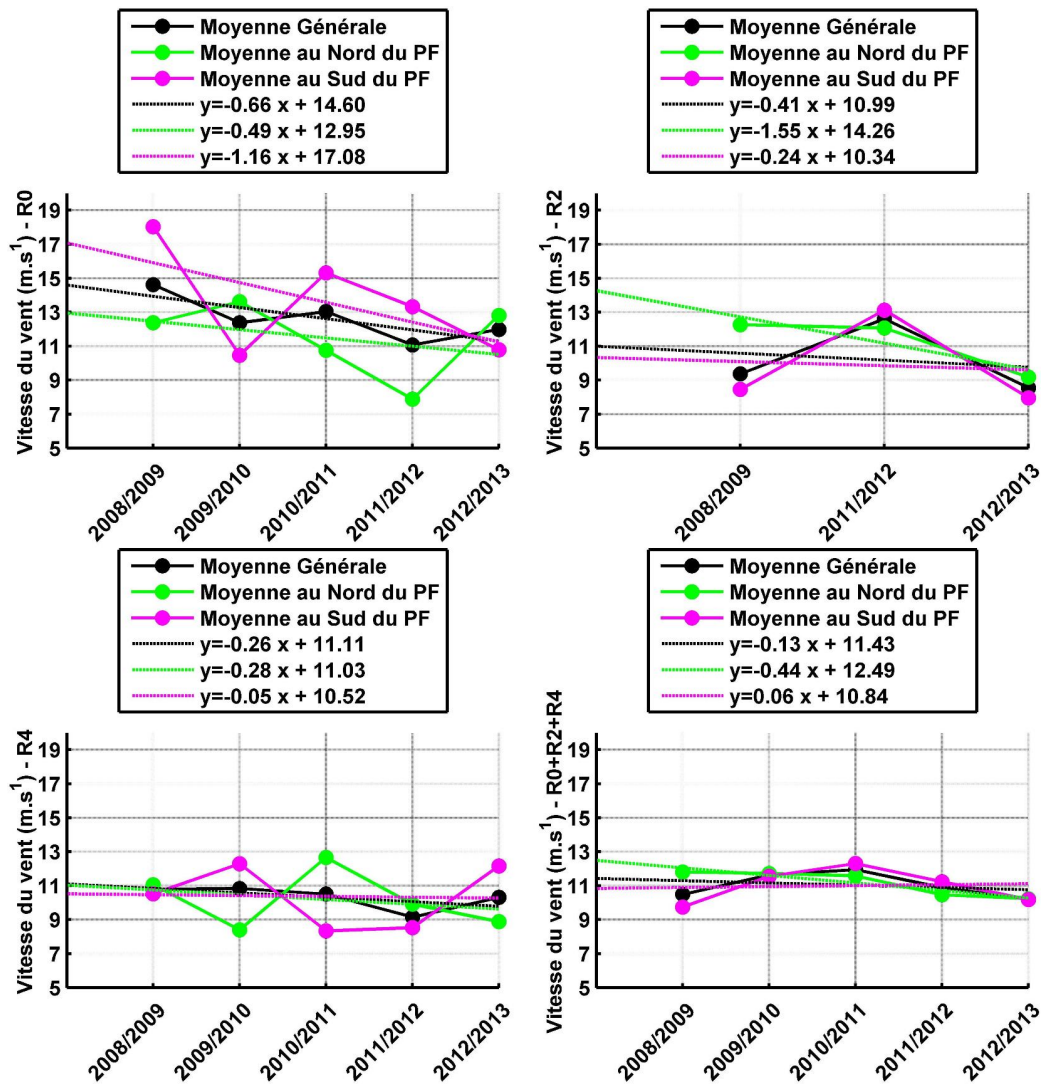


FIGURE 2.24 – Variabilité interannuelle de la vitesse du vent pour chaque rotation et pour une la période complète (R0+R2+R4).

En plus des sources de données présentées, j'ai pu participer à une campagne en mer au sein de la mission MINERVE R4 de 2014/2015 et sur laquelle nous avons pu récupérer des données de SST et SSS⁶, en plus d'échantillons analysés par la suite en laboratoire pour avoir l' A_T et le C_T . La vitesse du vent a elle aussi été récupérée.

Cette campagne s'est déroulée à la fin de la saison du 02/03/2015 au 19/03/2015. La figure 2.25 présente toutes les valeurs des données récoltées. Pour l' A_T , nous remarquons encore une fois la distribution parabolique avec un minimum de $2266 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ au niveau du front polaire et deux valeurs maximale de $2335 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ et de $2321 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ respectivement aux côtes australiennes et antarctiques. Pour le C_T , c'est aussi une distribution quasi-linéaire qui diminue du sud au nord avec des valeurs maximales et minimale respectivement au sud et au nord de $2183 \mu\text{mol.kg}^{-1}$ et $2048 \mu\text{mol.kg}^{-1}$.

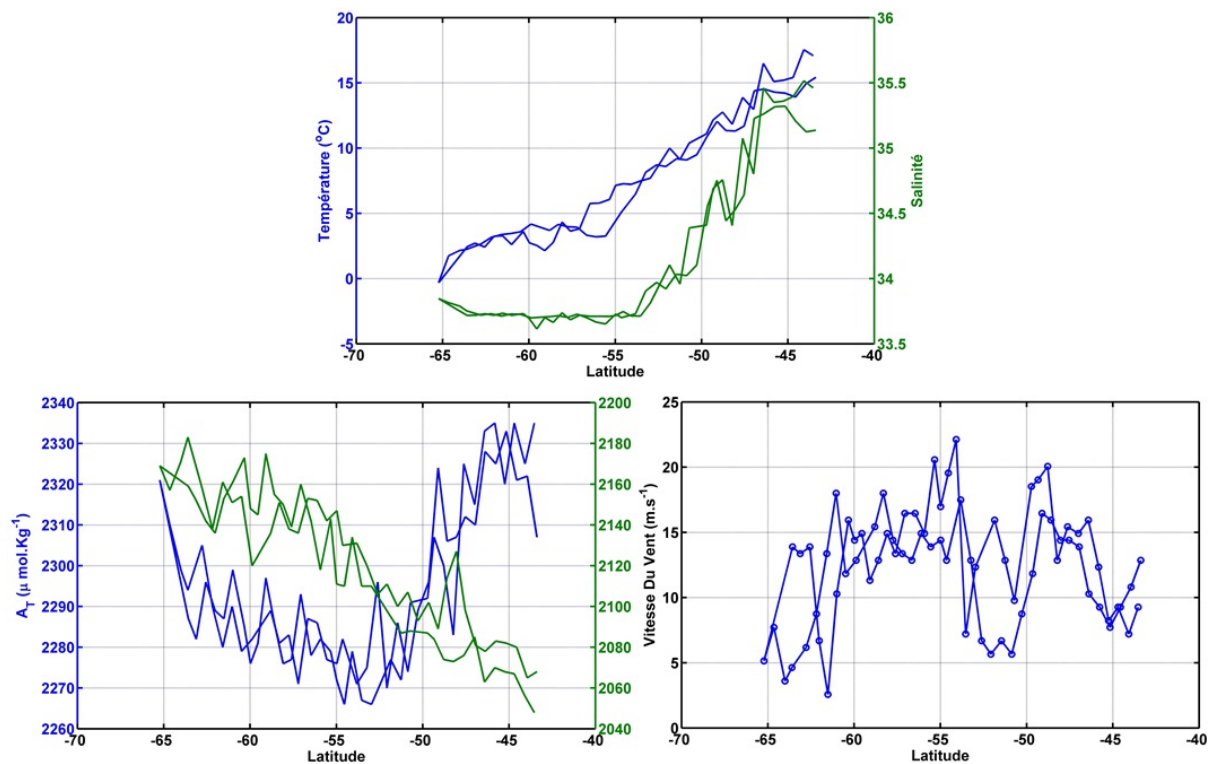


FIGURE 2.25 – Données récoltées lors de la campagne R4 en 2014/2015.

6. Les données du TSG ont été calibrées dans le cadre du projet SURVOSTRAL, nous utiliserons donc la SST et la SSS de SURVOSTRAL.

2.1.3 Format et mode de lecture :

Les données *in situ* nous ont été présentées sous format de fichier Excel (Microsoft Excel[®] est Tableur de création de feuilles de calcul), les missions MINERVE comme IMOS ne publient pas leur données sous le même format ; le fichier Excel de MINERVE est sous format *xlsx* (extension pour les tableurs par Microsoft Office[®]) et celui de IMOS en *csv* (Comma-separated values). Afin d'utiliser ces données, la première des choses est de les récupérer sur Matlab puis les mettre sous forme de tableaux utilisables sur cette plateforme, nous avons donc mis en place deux codes sources pour lire ces fichiers. On commence par les fichiers de la mission MINERVE, à noter que nous montrons l'exemple réalisé sur une rotation (la même procédure est suivie pour les deux autres) :

```

%%Lecture des fichiers de la mission MINERVE : %%
list = dir('data'); % liste de tout les fichiers du dossier "data"
list = list(3:end); % Elimination des entêtes
NUM=[]; % Contiendra toutes les colonnes numériques
TAB=[]; % Contiendra toutes les colonnes textuelles
TXT=[]; % Contiendra toutes les colonnes
for i=1:size(list,1) % pour chaque fichier
    fich = ['data\',list(i).name]; % nom du fichier
    % lecture avec une fonction prédéfinie (fichier Excel à Matrice) :
    [num, txt, tab] = xlsread(fich);
    txt=txt(2:end,:);tab=tab(2:end,:); % suppression des entêtes
    id=num(:,2)~=0; % suppression des lignes parasites
    % concaténation des matrice :
    num_1 = num(id,:);tab_1 = tab(id,:);txt_1 = txt(id,:);
    NUM=[NUM;num_1];TAB=[TAB;tab_1];TXT=[TXT;txt_1];
end
% sauvegarde des données dans un fichier Matlab nommé MINERVE
save('MINERVE','TXT','TAB','NUM');

```

CODE SOURCE 2.1 – Exemple d'importation des données MINERVE.

Ce code donne en sortie trois tableau⁷ NUM, TAB et TXT qui regroupent les données de toutes les années d'une même rotation, afin de faciliter une utilisation future des ces données (comparaison avec les données *sat*), nous avons choisi de les regrouper par journée, en gardant les deux informations importantes ; l'année et le numéro de la journée dans cette années, par exemple pour le 11 octobre 2011, l'année est évidemment 2011 et le numéro de la journée le 284 qui sera donc le nom du fichier résultat :

7. Le tableau NUM contient la partie du tableau initial qui ne comporte que des nombres (valeurs des paramètres), le tableau TAB contient la partie du tableau initial qui ne comporte que du texte (titre des colonnes, dates, etc.) et le tableau TXT les deux soit le tableau initial sous format texte

```

%initialisation des tableaux à la première ligne
NUM1=NUM(1,:); TAB1=TAB(1,:); TXT1=TXT(1,:);
limit=size(TXT,1); % taille des données
i=2; % compteur pour le parcours des tableaux
k=1; % compteur pour les numéros de journées
t_annee=[]; % contient les années
t_jour=[]; % contient les numéros de journées
while (i<=limit) % boucle sur tout les tableaux
    % si c'est le même jour on concatène dans le même tableau
    if(TXT{i,2}==TXT{i-1,2})
        eval(['NUM',num2str(k),'=[NUM',num2str(k),'NUM(i,:)]']);
        eval(['TAB',num2str(k),'=[TAB',num2str(k),'TAB(i,:)]']);
        eval(['TXT',num2str(k),'=[TXT',num2str(k),'TXT(i,:)]']);
    else
        % une fois qu'on trouve une nouvelle journée on sauvegarde le tableau en cours
        %récupération de l'année
        annee = TAB{i-1,2}; annee=[annee(7),annee(8),annee(9),annee(10),];
        t_annee=[t_annee;annee];
        %calcul du numéro de la journée
        num_jour=datenum(TAB{i-1,2},'dd/mm/yyyy')- ...
            datenum(['01/01/',annee],'dd/mm/yyyy')+1;
        t_jour=[t_jour;num_jour];
        %sauvegarde des données dans un fichier excel
        NomFich=['fini/',annee,'/',num2str(num_jour),'.xls'];
        xlswrite(NomFich, eval(['TAB',num2str(k)]));
        % On passe à une nouvelle journée avec des nouveaux tableaux
        k=k+1;
        eval(['NUM',num2str(k),'=[];']);eval(['TAB',num2str(k),'=[];']);
        eval(['TXT',num2str(k),'=[];']);
        eval(['NUM',num2str(k),'=[NUM',num2str(k),'NUM(i,:)]']);
        eval(['TAB',num2str(k),'=[TAB',num2str(k),'TAB(i,:)]']);
        eval(['TXT',num2str(k),'=[TXT',num2str(k),'TXT(i,:)]']);
    end
    i=i+1;
end
% On n'oublie pas de sauvegarder la dernière journée :
annee = TAB{i-1,2};
annee=[annee(7),annee(8),annee(9),annee(10),];
t_annee=[t_annee;annee];
num_jour=datenum(TAB{i-1,2},'dd/mm/yyyy')- ...
    datenum(['01/01/',annee],'dd/mm/yyyy')+1; t_jour=[t_jour;num_jour];
NomFich=['fini/',annee,'/',num2str(num_jour),'.xls'];
xlswrite(NomFich, eval(['TAB',num2str(k)]));
% On sevegarde les deux tableaux des numéros de jours et années
save('num_jour_annee','t_annee','t_jour');

```

CODE SOURCE 2.2 – Mise en forme et sauvegarde des données MINERVE par année et par numéro de jour.

2.2 Données Satellitaires

Nous entamons dans cette section la présentation et la définition des données *sat* utilisées dans la modélisation et la cartographie des résultats. Rappelons tout de même que notre but premier est de mettre en place des modèles pour avoir la pression partielle du CO₂ dans l'eau sous forme de carte régionale et à terme, cartographier le flux de CO₂ (FCO₂) dans cette même région.

Nous allons donc présenter les satellites et les données *sat* que nous avons choisi de sélectionner pour nos expérimentations. Cette sélection s'est faite essentiellement en partant du principe qu'un satellite est choisi si ce dernier propose des données dont on a besoin tel que la SST ou la chlorophylle, et que celui-ci était en exploitation durant les campagnes effectuées en bateau ; c'est à dire dans la même période que MINERVE, SURVOSTRAL et IMOS (entre 2002 et 2015). Nous mettons en avant le fait que toutes les données *sat* utilisées sont des données "gratuites" et "disponibles en ligne" en téléchargement libre.

Pour tous les satellites, nous avons utilisé les données en tant que telles, c'est à dire ce qui résultent des algorithmes⁸ de chaque satellite après traitement des données brutes (signal électromagnétique) reçues par ce dernier (ex : la SST sera directement exprimé en °C). Nous verrons dans les chapitres suivants lors des tests les erreurs et les biais qui peuvent subsister entre la valeur réelle et la donnée *sat*.

2.2.1 Les sources de données

Dans cette sous-section, nous présentons les différents satellites que nous avons étudié ainsi que les paramètres intéressants produits par ces derniers.

2.2.1.1 MODIS

MODIS pour *Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer* représente un ensemble d'instruments sous deux versions ; le Terra (initialement connu sous EOS AM-1) et l'Aqua (à l'origine connu comme EOS PM-1). L'orbite du Terra autour de la Terre est programmé de manière à ce qu'il passe du nord au sud de l'équateur le matin (d'où le AM), tandis que l'Aqua passe du sud au nord de l'équateur dans l'après-midi (d'où le PM). MODIS_{Terra} comme MODIS_{Aqua} présentent des données sur la surface de la terre entière tous les 1 à 2 jours, l'acquisition se fait par 36 bandes spectrales, (voir les spécifications techniques sur <http://modis.gsfc.nasa.gov/about/specifications.php>). Le but de la mise en orbite de MODIS est d'améliorer la compréhension de la dynamique mondiale et des processus qui se produisent sur la terre, dans les océans, et dans la basse atmosphère. MODIS joue un rôle vital dans le développement de modèles, Les informations récoltées autour du globe sont utilisées afin de prévoir les changements planétaires avec suffisamment de précision, et cela pour aider à la prise de décision concernant la protection de notre environnement (NASA Goddard Space Flight Center, Ocean Ecology Laboratory, Ocean Biology Processing Group, 2014).

MODIS_{Aqua} fait partie de la mission *Aqua Earth-observing satellite mission* (<http://aqua.nasa.gov/>) qui est elle même une partie du *Earth Observing System* (EOS, <http://eosps.nasa.gov/>) mis en place par la NASA. Le but de ce grand programme est de permettre la collecte

8. Les algorithmes de traitement des données *sat* sont disponibles en ligne dans les sites dédiés à chaque satellite.

de données sur le cycle de l'eau, y compris l'évaporation des océans, la vapeur d'eau dans l'atmosphère, les nuages, les précipitations, l'humidité du sol, la glace de mer, la glace de la terre et la couverture de neige sur la terre et la glace. Des variables supplémentaires sont également mesurées comprenant les flux d'énergie radiative, les aérosols, la couverture végétale sur la terre, le Phytoplancton et la matière organique dissoute dans les océans, ainsi que la SST de l'eau.

Nous avons choisi de travailler avec un type d'image proposé par la NASA et nommé *The Level 3 Standard Mapped Image product (SMI)* qui représente un produit sous forme d'image plate⁹ où chaque pixel donne une représentation numérique (dite flottante car c'est un nombre réel) d'un paramètre géophysique tel que la température. Ces produits sont donc des images de 8640×4320 pixels pour une résolution de $4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$ correspondant aux latitudes et longitudes respectivement dans l'intervalle $[90, -90]$ et $[-180, 180]$, un pas de $0,0416666668^\circ$ entre chaque pixel correspond à 4 km .

Le choix de ce type d'images s'est naturellement imposé, car d'un côté, il offre une facilité d'utilisation et d'intégration au sein de programmes informatiques, et de l'autre car ces images sont disponibles de façon complète (sur tout le globe) et sans interruption depuis le 4 Juillet 2002, et cela sur différentes échelles de temps (<http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/MODISA/Mapped/>) :

- 1 jour : une image représentant les données récoltées en une journée.
- 8 jours : on parle d'images composite de 8 jours soit un regroupement de 8 passages du satellite. Ce processus permet d'avoir des images avec plus de données sur une échelle de temps où le paramètre géophysique étudié à une variation moindre, on dit alors que cette image représente chaque journée des 8 jours qui compose l'image.
- Climatologie de 8 jours : ces images sont le fruit de plusieurs algorithmes combinant des données *sat* et *in situ*, l'inconvénient est que jusqu'à présent seuls quelques produits entre 2002 et 2003 sont disponibles.
- 1 mois : une image représentant une moyenne générale d'un mois, utilisée la plupart du temps pour l'analyse de la variabilité générale d'un paramètre dans une même année.
- 1 saison : une image par saison, utilisée en général pour l'étude de la variabilité inter-saisonnière et pour l'évolution inter-annuelle saisonnière d'un paramètre donné.
- 1 année : une image représentant la moyenne général sur une année.
- il existe aussi d'autres types moins utilisés comme les images cumulatives et les roulements sur 32 jours.

MODIS_{Aqua} nous a fourni des images *sat* de SST et de chlorophylle_a¹⁰ (Chl_a), la figure 2.26 donne un aperçu de la résolution de MODIS_{Aqua} pour ces deux paramètres.

9. On parle de *projection cylindrique équidistante*, appelée aussi *projection équirectangulaire* ou simplement *projection géographique* qui est un type de projection cartographique, c'est une transformation effectuée comme une projection de la surface du globe sur la surface d'un cylindre, dont l'axe se confond avec l'axe des pôles et contient les origines des vecteurs de projection. Les méridiens sont alors projetés sur des lignes verticales espacées de manière égale, et les parallèles sont aussi projetés sur des lignes horizontales équidistantes (espacement horizontal constant)

10. La chlorophylle_a est la principale forme de chlorophylle présente chez les organismes qui mettent en œuvre la photosynthèse.

2.2.1.2 AQUARIUS

Le satellite AQUARIUS est le fruit de la mission qui porte le même nom, et qui part d'une collaboration entre la NASA et l'agence spatiale de l'Argentine, la *Comisión Nacional de Actividades Espaciales* (CONAE) avec la participation du Brésil, du Canada, de la France et de l'Italie. Cette mission a permis à la NASA d'avoir les premières observations globales de SSS de la mer, le but étant d'avoir des cartes mensuelles de SSS de la mer avec une résolution spatiale de 150 km au cours de la durée de vie de la mission.

AQUARIUS part du constat que malgré les rôles clés que joue la SSS dans le climat, les mesures de SSS de surface de l'océan ont, jusqu'à tout récemment, été limitées à des données disparates recueillies par des navires, des bouées et des campagnes scientifiques à travers le monde. Lancé en juin 2011, ce satellite avait pour but de mieux comprendre les processus régionaux et mondiaux qui relient les variations de la SSS des océans au changements climatiques dans le cycle global de l'eau, et comment ces variations influent sur la circulation océanique et le climat en général.

La durée de vie du satellite ainsi que la mission était programmée pour trois années, ce dispositif expérimental a continué à produire des données sur la SSS jusqu'en juin 2015 (<http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/Aquarius/V3/V3.0/Mapped/>). Les images *sat* d'AQUARIUS sont disponibles sous différentes échelles de temps ; un jour, une image composite de 8 jours (comme MODIS_{Aqua}), un mois, une saison et une année. D'autres produits sont aussi disponibles comme des climatologies d'un mois ou d'une saison. La figure 2.26 présente un échantillon d'image *sat* issue d'AQUARIUS.

2.2.1.3 SMOS

SMOS est le diminutif de *Soil Moisture and Ocean Salinity*, et qui résume le but de ce satellite ; c'est à dire fournir des cartes d'humidité des sols et de SSS des océans.

La responsabilité de la mission revient à l'*Agence Spatiale Européenne* (ESA) en coopération avec le *Centre National d'Études Spatiales* (CNES - France) et le *Centre pour le Développement Industriel et Technique* (CDTI - Espagne). Cette mission a été proposée dès 1998 par une équipe scientifique internationale dirigée par Yann Kerr. Le but était d'étudier les activités autour des terres émergées, des océans, de la cryosphère¹¹. Bien évidemment, d'autres activités transversales étaient visées comme la météorologie, la climatologie, les campagnes de validation et les activités communes avec les projets similaires tel que AQUARIUS (Organisation, <https://smos.cnes.fr>).

SMOS a été lancé en novembre 2009, et depuis, produit entre autres, des images de SSS des océans avec une résolution spatiale de $0,25^\circ \times 0,25^\circ$ ($\sim 25 \text{ km} \times 25 \text{ km}$), avec des échelles de temps différentes, la plus petite est de 3 jours pour une image, puis celle sur 7 jours, un mois, une saison et une année.

11. Les portions de la surface de la terre où l'eau est présente à l'état solide, incluant les banquises, les lacs et rivières gelés, les glaciers, les régions couvertes de neige et les sols gelés.

2.2.1.4 ASCAT

L'*Advanced Scatterometer* (ASCAT) représente l'instrument qui été lancé à bord du satellite EUMETSAT MetOp-A en octobre 2006, mais est devenu pleinement opérationnel en mai 2007 et continue de fonctionner jusqu'à aujourd'hui. Un deuxième instrument ASCAT a lui aussi été lancé à bord du MetOp-B en septembre 2012. Les deux instruments sont identiques, le nom ASCAT est utilisé pour faire référence aux données *sat* produites par les deux.

L'objectif premier de ce satellite est la mesure de la vitesse du vent et sa direction à travers les océans, mais la technologie qu'il embarque sert aussi à l'étude de la glace, l'humidité des sols et la végétation.

ASCAT produit pour les utilisateurs une base de données d'image *sat* avec une résolution spatiale de $0,25^\circ \times 0,25^\circ$ soit des image de 1440×720 pixels. La résolution temporelle est quant à elle disponible sur 1 jour, une semaine et un mois (`ascat`, `missions`, <http://www.remss.com/> et <ftp://ftp.ifremer.fr/ifremer/cersat/products/gridded/MWF/L3/ASCAT/>).

2.2.1.5 QSCAT

QSCAT est le diminutif de *Quik Scatterometer* (aussi nommé QuickSCAT) qui a été mis en orbite par la NASA en juin 1999 et qui a continué à opérer jusqu'en novembre 2009.

QSCAT est vite devenu l'un des satellites météorologiques les plus utilisés, les prévisionnistes du monde entier se sont basés sur les données produites par celui-ci afin d'émettre des avertissements en temps réel et de faire des prévisions précises des tempêtes tropicales et extra-tropicales pour l'aviation. Il a aussi servi à déterminer la hauteur des vagues, l'extension de la glace de mer, le mouvement des icebergs, etc. Initialement prévu pour durer seulement 2 à 3 ans, QSCAT a passé dix ans en orbite ce qui témoigne de l'ingénierie déployé en ce temps là pour la conception du satellite (`qscat`, `missions`, <http://www.remss.com/>).

Les données récoltées par QSCAT ont subi un retraitement final après que l'instrument ait cessé de fonctionner. Ces données sont mis à disposition des utilisateurs sous différentes échelles de temps (un jour, 3 jours, une semaine, un mois et une année) avec une résolution spatiale de $0,25^\circ \times 0,25^\circ$. Pour chaque produit de QSCAT trois images sont données; une image dite *ascendante* et une deuxième *descendante* suivant la direction orbitale, et une troisième qui est une fusion des deux. Ce dernier type d'images est celui qu'on a utilisé dans nos expériences car il donne une couverture suffisante pour étudier la zone en question.

Pour notre thèse, nous avons pris en considération dans un premier temps les données de ASCAT (section 2.2.1.4) lors de la mise en place de modèles car elles couvraient la même période de temps que les données *in situ* (Chapitre 5), les données de QSCAT sont donc un complément (entre 2002 et 2008) que nous avons utilisé à la fin de toutes les expérimentations pour donner des résultats globaux sur notre échelle de temps entre 2002/2003 et 2014/2015.

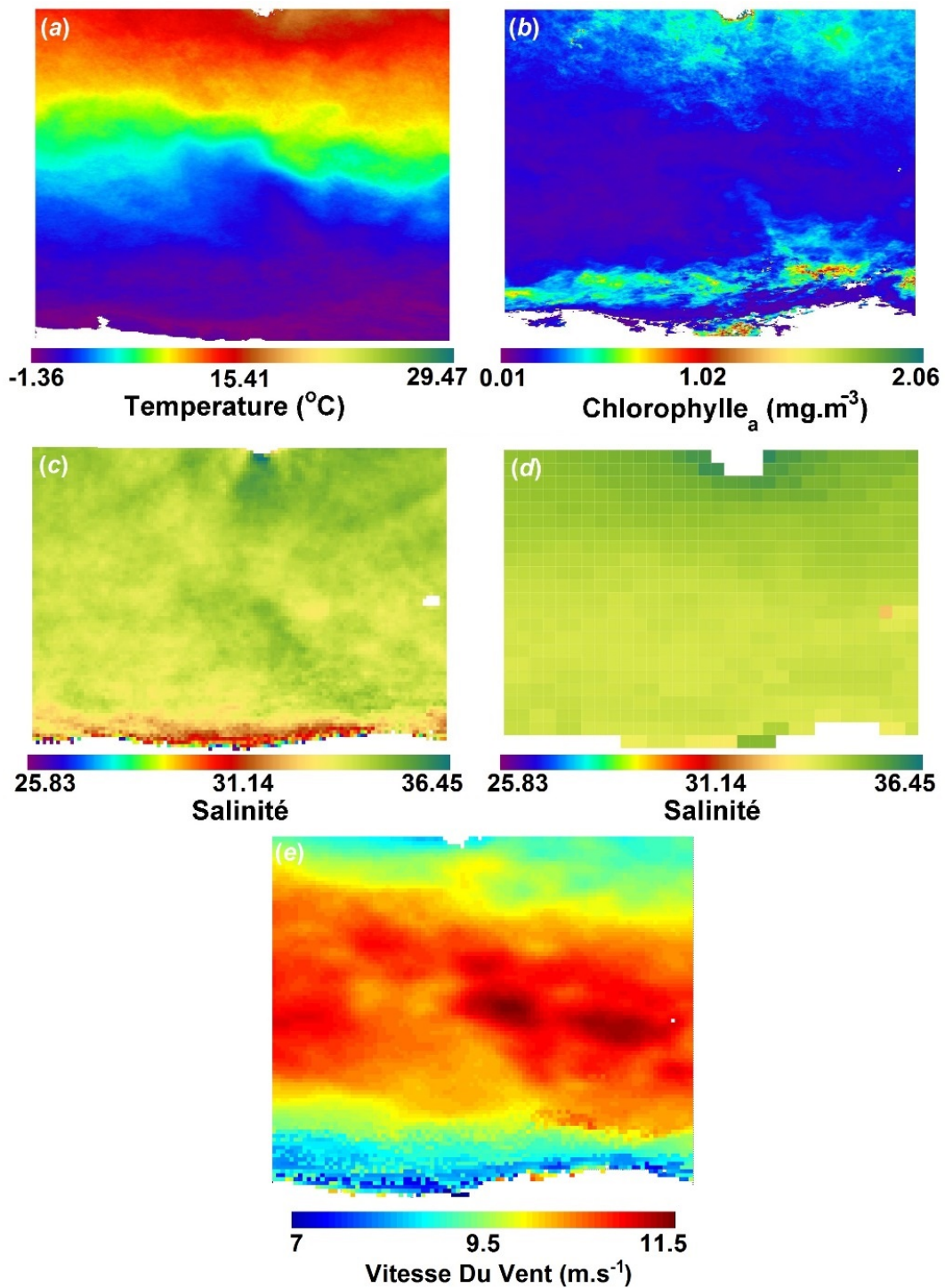


FIGURE 2.26 – Exemple d'image de moyenne annuelle des paramètres *sat*, (a) : Température par MODIS_{Aqua}, (b) : Chlorophylle_a par MODIS_{Aqua}, (c) : Salinité par SMOS, (d) : Salinité par AQUARIUS, (e) : Vitesse du vent par ASCAT.

2.2.2 Analyse des données *sat*

Nous allons voir dans cette sous-section la variabilité des données *sat* utilisées ; nous utiliserons des images mensuelles de notre région (de -43°S à -67°S et de 136°E à 160°E) afin d'observer l'évolution d'un paramètre au sein de la période qui s'étend du printemps à l'été austral et sa variabilité inter-annuelle, ainsi que la variabilité inter-annuelle de la saison. Tout cela sera bien sûr fait suivant la disponibilité des images *sat*.

2.2.2.1 La Température

Dans cette thèse, nous utilisons les données de SST issue du satellite MODIS_{Aqua} (section 2.2.1.1). Ces données de SST couvre toute la période des données *in situ* et sont disponibles de 2002 à aujourd'hui.

La figure 2.27 présente la distribution de la SST du printemps à l'été austral en (a) et la variabilité inter-annuelle de cette période au fil des années en (b). Cette dernière est marquée par une SST qui part d'une valeur moyenne de $\sim 4,5^{\circ}\text{C}$ pour augmenter au fil des mois et atteindre les $\sim 6,5^{\circ}\text{C}$ en fin de saison pour repartir à la baisse en mars, à noter que toutes les latitudes sont prises en compte (du sud de la Tasmanie aux côtes Antarctiques).

Ce que l'on remarque dans la figure 2.27.b c'est que, comme pour les données *in situ*, la SST augmente de 2002/2003 à 2014/2015 (comparé à la figure 2.10). Cette augmentation est certes, bien moins élevée que celle des données *in situ*, mais cela est dû au fait que l'image *sat* couvre bien plus l'océan et encore plus les zones proches de la banquise (plus froides) ce qui à pour cause de tirer la moyenne vers le bas, néanmoins, nous pouvons estimer que la SST, telle que donnée par le MODIS_{Aqua}, a augmenté d'une années à une autre avec une pente de $\sim 0,013^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ ce qui équivaut à $\sim 0,17^{\circ}\text{C}\cdot\text{an}^{-1}$ de plus en treize ans.

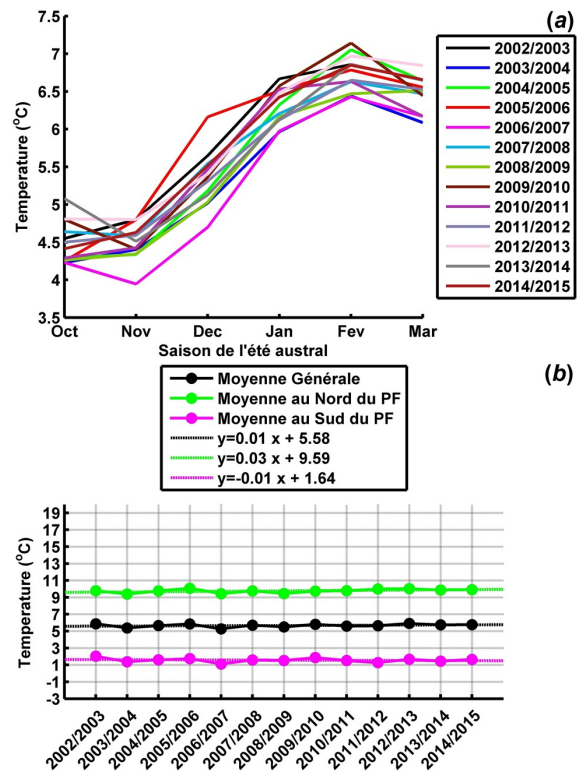


FIGURE 2.27 – Distribution moyenne de la température donnée par les images *sat* de MODIS_{Aqua}, (a) : variabilité de la température du printemps à l'été austral pour chaque année, (b) : Variabilité inter-annuelle de la SST avec la moyenne pour chaque région.

2.2.2.2 La Salinité

La SSS des océans par satellite est l'une des dernières technologies mises en place par les agences spatiales, nous avons traité dans cette thèse deux satellites ; AQUARIUS (section 2.2.1.2) et SMOS (section 2.2.1.3).

SMOS a commencé à produire des données depuis novembre 2009, AQUARIUS depuis juin 2011 puis a été stoppé en juin 2015 ; ceci implique que vis-à-vis de nos données *in situ* (de 2002/2003 à 2014/2015), ces données ne peuvent fournir que quatre à cinq années de couverture temporelle. Cette échelle de temps restreinte et -nous le verrons par la suite- la différence entre données *sat* et *in situ* nous a poussé à trouver un moyen de cartographier la SSS sur tout notre intervalle de temps (ce travail sera présenté en détails dans le Chapitre 3).

Les figures 2.28 et 2.29 donnent respectivement la distribution de la SSS au cours de notre période ainsi qu'au fil des années. Sur une échelle de temps de quatre années communes aux deux satellites, nous pouvons d'ores et déjà voir qu'il subsiste des différences entre les deux en terme d'estimation de la SSS ; au cours de la saison, on remarque un décalage de $\sim 0,4$ entre SMOS et AQUARIUS (avec une estimation plus élevée pour AQUARIUS), on peut aussi observer que la SSS diminue au fil de la période mais repars à la hausse à partir de février mais que cette dernière continue de baisser avec AQUARIUS. Il faut rappeler aussi que les deux satellites ont une résolution spatiale très différente (la résolution de SMOS est sept fois plus fine que celle d'AQUARIUS), et ceci a pour effet d'influer sur des moyennes générales telles que celles-ci.

Dans la partie (b) des deux figures 2.28 et 2.29, nous voyons encore une fois la différence entre les deux satellites, même si nous ne pouvons pas dire que la SSS augmente ou baisse au fil des années avec les données *in situ*, les données SMOS montre une tendance à la baisse de l'ordre de $\sim -0,03 \text{ an}^{-1}$ alors qu'AQUARIUS montre une légère tendance à la hausse de l'ordre de $\sim 0,009 \text{ an}^{-1}$.

Tout cela montre que la SSS par satellite est encore au stade de calibrage et de mise en place d'algorithmes de traitement de données pour avoir une SSS correctement estimée. L'importance d'avoir la SSS pour atteindre notre but du calcul du flux doit donc impérativement se faire en trouvant un moyen d'avoir la SSS mieux estimée par satellite.

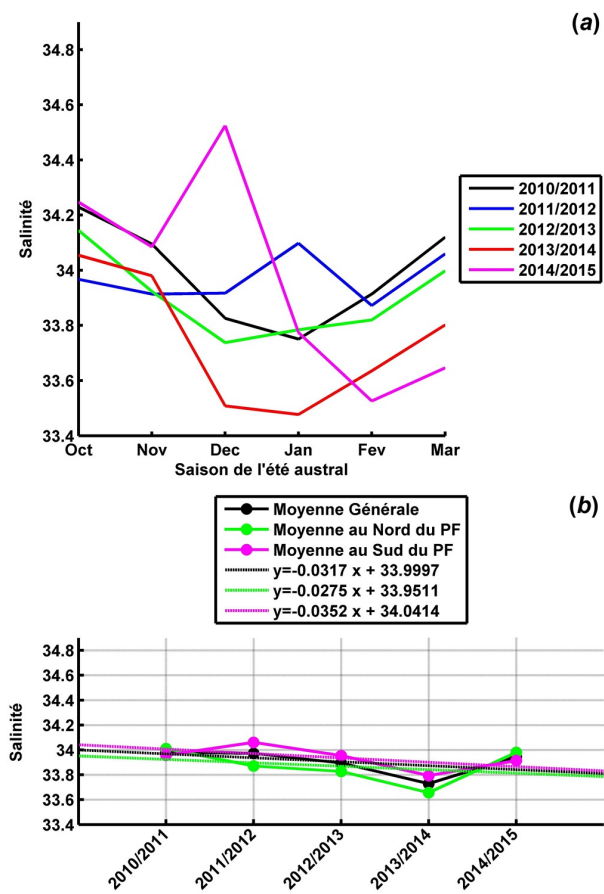


FIGURE 2.28 – Distribution moyenne de la salinité donnée par les images *sat* de SMOS, (a) : variabilité de la salinité du printemps à l'été austral pour chaque année, (b) : Variabilité inter-annuelle de la salinité avec la moyenne pour chaque région.

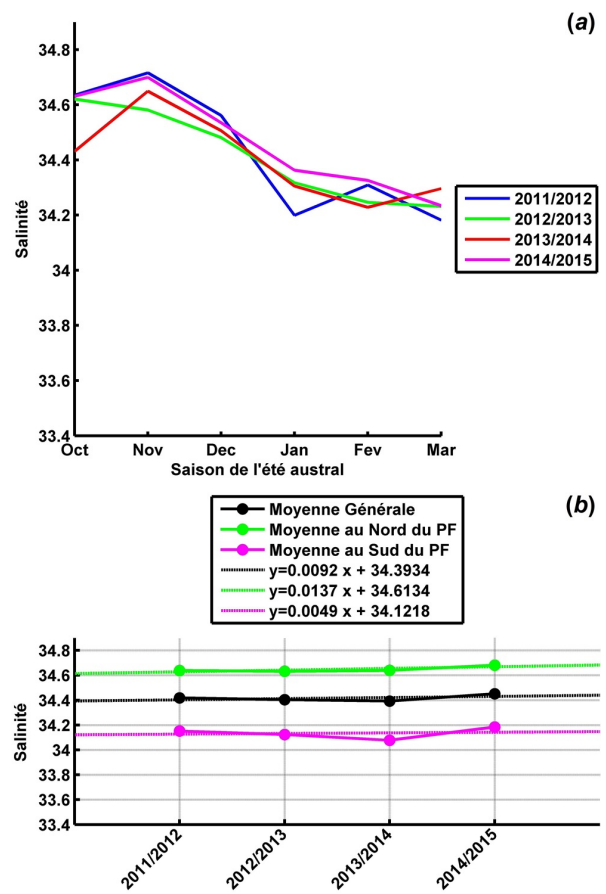


FIGURE 2.29 – Distribution moyenne de la salinité donnée par les images *sat* d'AQUARIUS, (a) : variabilité de la salinité du printemps à l'été austral pour chaque année, (b) : Variabilité inter-annuelle de la salinité avec la moyenne pour chaque région.

2.2.2.3 La Chlorophylle a

La chlorophylle a ($Chla$) est donnée par $MODIS_{Aqua}$, elle est donc disponible sur la même résolution spatiale et temporelle que la température.

La figure 2.30 présente la distribution de la $Chla$ au seins de la période étudiée en (a) et la variabilité inter-annuelle de cette dernière au fil des années en (b). La période est marquée par une $Chla$ qui part d'une valeur moyenne de $\sim 0,2$ $mg\ Chla.m^{-3}$ pour augmenter au fil des mois et atteindre les $\sim 0,35$ $mg\ Chla.m^{-3}$ en fin de période. Toutes les latitudes sont prises en compte (du sud de la Tasmanie aux côtes Antarctiques). Au cour de la saison de l'été austral, la $Chla$ augmente du début à la fin de la saison ce qui correspond à une activité biologique en augmentation (plus d'activité biologique en été).

Globalement, on remarque une très légère tendance à la baisse de l'ordre de $\sim -0,002\ an^{-1}$, avec une $Chla$ qui augmente puis diminue au fil des années. On remarque une $Chla$ plus importante au sud qu'au nord du PF ; nous retrouvons les hausses de $Chla$ au niveau des côtes de la Tasmanie mais aussi beaucoup plus à l'approche des côtes Antarctiques. L'augmentation de la $Chla$ par définition implique une activité biologique intense qui influe sur le CO_2 dissous.

Nous n'avons malheureusement pas eu accès à des données *in situ* de $Chla$ pour contraindre les données *sat* et avoir un point de comparaison.

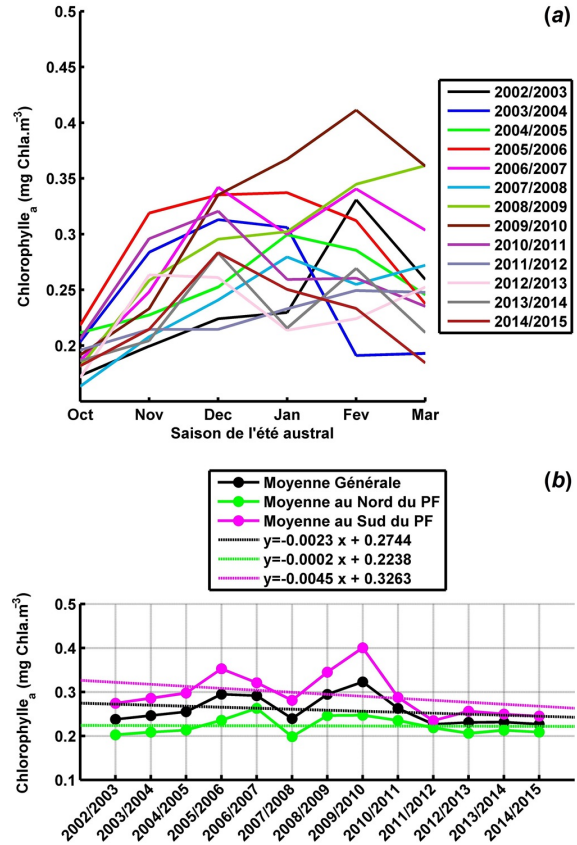


FIGURE 2.30 – Distribution moyenne de la chlorophylle_a donnée par les images *sat* de $MODIS_{Aqua}$, (a) : variabilité de la chlorophylle_a du printemps à l'été austral pour chaque année, (b) : Variabilité inter-annuelle de la chlorophylle_a avec la moyenne pour chaque région.

2.2.2.4 Vitesse du Vent

La vitesse du vent nous sert dans nos expérimentations à inclure son effet dans le calcul du flux de CO₂ (FCO₂) qui dépend étroitement de l'agitation de la surface de l'eau.

La vitesse du vent, comme montré dans la figure 2.31, se comporte de façon parabolique au fil de la saison en diminuant d'octobre à fin décembre pour remonter par la suite. Contrairement aux données *in situ*, la vitesse du vent est ici disponible sur une échelle de temps beaucoup plus grande et nous remarquons qu'au fil des années, la vitesse du vent prend en moyenne une pente à la hausse, néanmoins, celle-ci n'est que de $\sim 0,02 \text{ m.s}^{-1}.an^{-1}$ soit une vitesse moyenne du vent qui aurait augmenté de $\sim 0,25 \text{ m.s}^{-1}.an^{-1}$ en treize ans (non-significative).

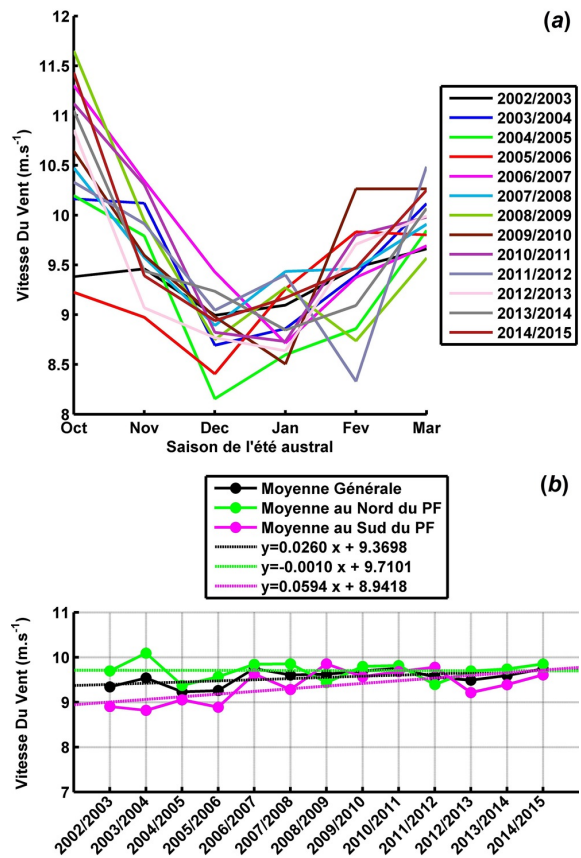


FIGURE 2.31 – Distribution moyenne de la vitesse du vent donnée par les images *sat* des deux satellites QSCAT et ASCAT, (a) : variabilité de la vitesse du vent durant la saison australe pour chaque année, (b) : Variabilité inter-annuelle de la vitesse du vent avec la moyenne pour chaque saison.

2.2.3 Format et mode de lecture

Nous allons dans cette sous-section présenter les différents formats de fichiers *sat* tels qu'ils sont disponibles pour l'utilisateur, nous verrons aussi comment, suivant chaque format, nous avons procédé pour la lecture et l'exploitation de ces données ; à noter que dans cette partie, nous nous focaliserons sur notre région d'intérêt. Nous avons choisi de sélectionner une partie de l'image *sat* correspondante aux données *in situ*, les latitudes seront donc comprises entre 43°S et 67°S et les longitudes entre 136°E et 160°E.

Les données *sat* sont de différents formats, les plus utilisés sont :

1. Le HDF pour *Hierarchical Data Format*, qui est un ensemble de formats de fichiers permettant de sauvegarder et de structurer des fichiers de très grandes tailles (quantités de données élevées), on parle de *conteneur de fichiers*. Ce format de fichier est utilisé pour les données de SST et la Chla de MODIS_{Aqua} ainsi que pour la salinité d'AQUARIUS. MATLAB[®] embarque une fonction permettant la lecture de ce type de fichier, le code suivant présente, sous forme d'un exemple, comment nous avons procédé pour lire les données *sat* de MODIS_{Aqua}, nous avons par la suite structuré ces données sous forme d'une matrice de trois colonnes comprenant les latitudes, les longitudes et la SST.

```

% LatLon est une matrice contenant les latitudes et longitudes de tous
% les points de la région d'intérêt
load LatLon;
Image=LatLon;
% Lecture du fichier sat de température (MODIS_AQUA) et application
% de la fonction de mise à l'échelle donnée dans le guide d'instruction
data=hdfread(['D:/sst/A2007019.L3m_DAY_SST_4'], 'l3m_data');
data=double(data);
data1=data*0.000717185-2; % mise à l'échelle
none=data1<45; % élimination des points sans données
data1=data1.*none;
% Sélection de la région d'intérêt
% Les chiffres correspondent aux positions des latitudes et longitudes
temp=data1(3205:3745,7585:8161)';
% Mise en forme de la matrice résultat
Image=[Image,temp(:)];
Data = Image(Image(:,3) ~= 0,:); % élimination des points sans données
save A2007019 Data % Sauvegarde du résultat (année 2007 jour numéro 19)

```

CODE SOURCE 2.4 – Exemple de lecture de fichier *sat* de température MODIS_{Aqua}.

2. Le deuxième format est le NetCDF (Network Common Data Form) avec l'extension *nc*, c'est un format de données dit *auto-documenté* car ce dernier est sous la forme d'un en-tête qui décrit la disposition des données dans le reste du fichier ; en particulier des tableaux de données, il peut aussi contenir dans cet en-tête une liste arbitraire de méta-données sous la forme d'attributs de type nom/valeur. Ce type de fichier est utilisé pour les données *sat* de SMOS, ASCAT et QSCAT et très récemment (durant l'année 2016), MODIS_{Aqua} fait

une migration de ses données vers ce type de fichier. Le code source 2.5 suivant présente un exemple de lecture d'un fichier NetCDF de vitesse du vent.

```

% LatLonWS est une matrice contenant les latitudes et longitudes de tous
% les points de la région d'intérêt
Image=LatLonWS;
% Lecture du fichier sat de Vitesse du Vent et application
% de la fonction de mise à l'échelle donnée dans le guide d'instruction
ncid = netcdf.open(['D:/S2011_299.nc'],'NC_NOWRITE');
% La vitesse du vent représente l'attribut 4
[varname, xtype, varDimIDs, varAtts] = netcdf.inqVar(ncid,4);
% Récupération de la vitesse du vent le fichier .nc
ws = netcdf.getVar(ncid,4);
% Mise sous forme de matrice de la vitesse du vent
ws=ws'; % transposé de la matrice
ws=flipud(ws); % Application de l'effet miroir
ws=double(ws); % Conversion des valeurs en nombres réels
ws=ws.*0.01; % Mise à l'échelle (guide d'instruction)
temp=ws(493:586,1264:1361)'; % Sélection de la région d'intérêt
Image=[Image,temp(:)]; % Création de la matrice finale
Data = Image(Image(:,3)> 0,:); % Elimination des points sans données
save S2011_299 Data % Sauvegarde du résultat (année 2011 jour numéro 299)

```

CODE SOURCE 2.5 – Exemple de lecture de fichier *sat* de vitesse du vent QUICKSAT.

Nous voyons bien que quelque soit le format du fichier source de données *sat*, nous avons choisi de les mettre sous forme d'une matrice avec trois colonnes; latitudes, longitude, et paramètre donné. Cette restructuration de tous les fichiers *sat* nous a permis de standardiser toutes les données *sat* en un seul format; ceci afin de faciliter l'exploitation des ces derniers d'une façon unique.

2.3 Méthodes utilisées

Nous allons dans cette section donner la définition des méthodes que nous avons utilisées lors de nos expérimentations. Ces méthodes proposent des solutions à des problèmes de modélisation à des fins d'estimation d'un paramètre donné; le but étant de proposer une solution qui puisse *estimer*¹²/*interpolé*¹³ un paramètre dit *sortie désirée* ou *but*, cela en utilisant d'autres paramètres à notre disposition que l'on nomme couramment *paramètres d'entrée du modèle*.

12. Recherche de la valeur d'un ou de plusieurs paramètres d'une loi statistique à partir d'observations ou de sondages sur un ou plusieurs échantillons d'une population(<http://www.larousse.fr/>).

13. Opération consistant à déterminer, à partir d'une série statistique succincte aux valeurs trop espacées, de nouvelles valeurs correspondant à un caractère intermédiaire pour lequel aucune mesure n'a été effectuée (<http://www.larousse.fr/>).

2.3.1 La régression linéaire simple (RLS)

Pour introduire la notion de modélisation, rien de mieux que de parler de la forme la plus simple qui est la modélisation linéaire, et cela par le modèle le plus élémentaire qui est la régression linéaire simple.

La régression linéaire de façon générale se définit comme une investigation sur des données d'observations ou d'expérimentations, où l'objectif principal est la recherche d'une *liaison linéaire* entre une variable Y (la sortie désirée) et une variable X (entrée du modèle) (Philippe Besse, 2003).

On parle de RLS lorsque l'on recherche une relation préalable de causalité dans le sens où Y dépend de X . On suppose donc qu'en moyenne, $E(Y)$, est une fonction affine de X . La formulation mathématique s'écrit de la sorte :

$$E(Y|X) = f(X) = \beta_0 + \beta_1 X \quad (2.1)$$

Les *erreurs* ou *écarts* engendrés pour chaque couple (x_i, y_i) est appelé *résidu* et noté u_i . La figure 2.32 donne un exemple de RLS avec les résidus associés à cette dernière.

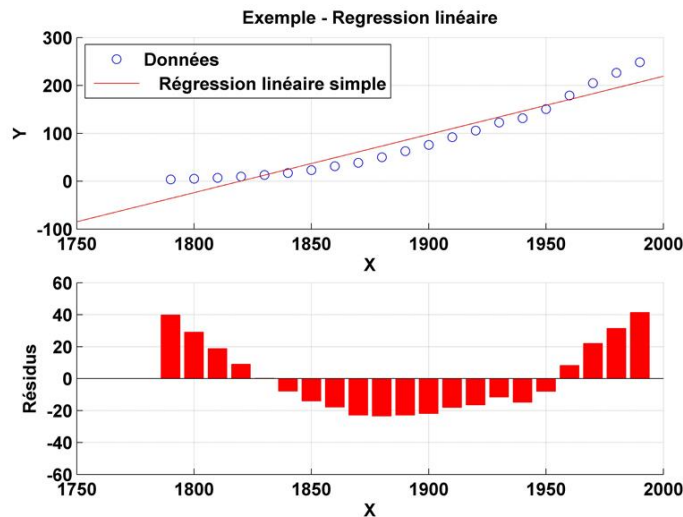


FIGURE 2.32 – Exemple d'une régression linéaire simple.

La recherche des coefficients β se fait le plus souvent¹⁴ par la méthode des *moindres carrés* (Diener et Diener, 2007). Cette méthode, très utilisée car facile à mettre en œuvre, cherche à minimiser la somme des carrés des écarts entre les observations et le modèle ; pour un ensemble d'observations $\{(x_i, y_i) | i = 1.., n\}$, la formulation mathématique s'écrit :

$$\min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \quad (2.2)$$

14. On peut aussi estimer un modèle par le *maximum de vraisemblance* ou encore par *inférence bayésienne*

Ceci revient à chercher, parmi toutes les droites possibles, celle qui passe par le nuage de points $\{(x_i, y_i) | i = 1, \dots, n\}$ et qui a la propriété de rendre minimale la somme des carrés des écarts des valeurs observés y_i ; cette droite vérifie :

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i \quad \text{avec} \quad y_i = \hat{y}_i + u_i \quad (2.3)$$

le calcul b_0 et b_1 se fait suivant la procédure :

1. soit (\bar{x}, \bar{y}) le centre de gravité du nuage tel que :

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (2.4)$$

2. soit la variance de X notée s_x^2 tel que :

$$s_x^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad (2.5)$$

et la covariance des variables X et Y notée cov_{xy} tel que :

$$cov_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \quad (2.6)$$

3. les deux coefficients b_0 et b_1 s'écrivent :

$$b_1 = \frac{cov_{xy}}{s_x^2} \quad (2.7)$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x} \quad (2.8)$$

L'étape après la régression est l'évaluation de cette dernière, la qualité de l'approximation du nuage de points par une droite est généralement contrôlée par son coefficient de corrélation linéaire, il est compris entre +1 et -1; plus sa valeur s'approche de ces deux valeurs plus l'estimation est bonne. Le coefficient de corrélation représente la covariance entre X et Y rapporté au produit des deux écarts-types des x_i (noté σ_x) et y_i (noté σ_y), noté r_{xy} (ou R) :

$$r_{xy} = \frac{cov_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} \quad (2.9)$$

Sachant que l'écart-type mesure la dispersion d'un ensemble de données; plus il est faible, plus les valeurs sont regroupées autour de la moyenne. Il est définie par la racine carré de la variance :

$$\sigma_x = \sqrt{s_x^2}, \sigma_y = \sqrt{s_y^2} \quad (2.10)$$

On trouve aussi dans la littérature une estimation de la qualité d'une régression par l'*indice de confiance* ou *Coefficient de détermination*; il représente le carré du coefficient de corrélation noté r^2 (ou R^2) :

$$r^2 = r_{xy} r_{xy} \quad (2.11)$$

Cette indice de confiance est compris entre 0 et +1. Bien que cela reste une hypothèse qui dépend fortement du problème étudié et du niveau d'erreurs acceptables pour ce dernier, la régression est dite *bonne* lorsque $r^2 \geq 0.85$ ce qui revient à dire que le modèle explique plus de 85% de la variation totale.

2.3.2 La régression linéaire multiple (RLM)

La régression linéaire multiple est la généralisation de la régression linéaire simple pour l'étude de données multidimensionnelles.

Contrairement à la RLS qui cherche une relation entre une variable Y et X , la RLM cherche une relation entre une variable à *expliquer* Y et p variables *explicatives* X^1, \dots, X^p . L'ensemble de points est donc représentées comme $(x_i^1, \dots, x_i^j, \dots, x_i^p, y_i) i = 1, \dots, n$.

La généralisation de l'équation 2.1 devient alors :

$$E(Y|X^1, \dots, X^p) = f(X^1, \dots, X^p) = \beta_0 + \beta_1 X^1 + \beta_2 X^2 + \dots + \beta_p X^p \quad (2.12)$$

L'estimation se fait elle aussi par la généralisation de la méthode des moindres carrés, l'expression à minimiser devient alors :

$$\min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i^1 - \beta_2 x_i^2 - \dots - \beta_p x_i^p)^2 \quad (2.13)$$

L'équation de régression engendrée vérifie donc :

$$\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i^1 + b_2 x_i^2 + \dots + b_p x_i^p \quad \text{avec} \quad y_i = \hat{y}_i + u_i \quad (2.14)$$

La figure 2.33 présente un exemple de RLM où une sortie désirée est estimée par deux paramètres en entrée.

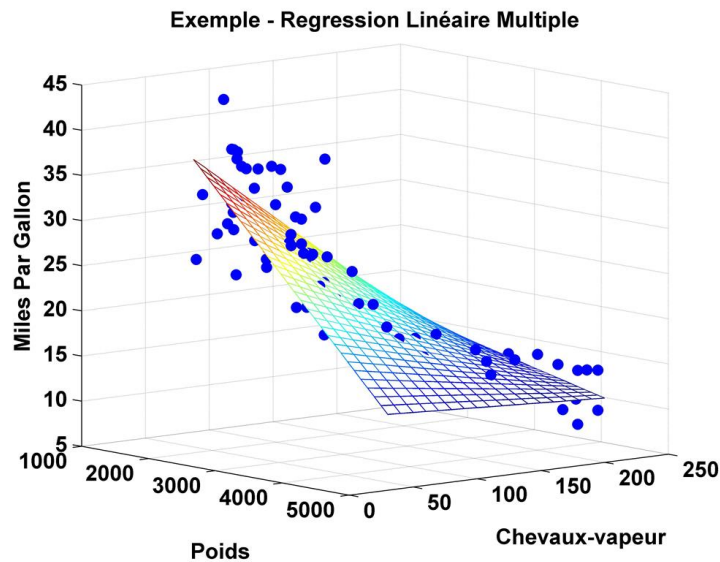


FIGURE 2.33 – Exemple d'une régression linéaire multiple sur un problème de distance parcouru par une voiture suivant le poids et les chevaux-vapeur du moteur.

2.3.3 Les réseaux de neurones (RN)

Les réseaux de neurones regroupent l'ensemble de mécanismes de calcul, tous inspirés de la neurobiologie, ils concernent aussi bien les chercheurs en développement de ces systèmes que ceux qui les utilisent pour la construction et le développement de modèles. La recherche dans ce domaine implique donc un certain nombre de disciplines différentes partant des biologistes qui décrivent le fonctionnement du système neurologique aux techniciens qui développent des outils pour améliorer les performances d'un système donné, en passant par les psychologues qui décrivent le système cognitif.

La description du neurone biologique montre la très grande variété de briques élémentaires constituant le système nerveux. On parle de neurones artificiels lorsqu'on formalise cette description; ces derniers se caractérisent, au contraire, par leur simplicité, qui rend possible leur description mathématique (Benallal et Moussa, 2011).

Un neurone artificiel dit *formel* représente l'élément de base dans la construction et l'élaboration d'un réseau de neurones. le premier modèle duquel découle tous les autres, a été proposé par McCulloch et Pitts (1943). La figure 2.34 montre le schéma fonctionnel de base d'un neurone artificiel; ainsi, un neurone formel k représente la somme pondérée v_k d'un ensemble d'entrées x_1, x_2, \dots, x_n plus un biais b_k propre au neurone. La sortie de ce neurone y_k est l'application d'une fonction d'activation φ sur la somme pondérée (avec w_{ki} correspondant au poids synaptiques, généralement on note la somme pondérée plus le biais u_k). L'équation mathématique qui formalise cette sortie s'écrit de la sorte :

$$y_k = \varphi(u_k) = \varphi\left(\sum_{i=1}^n x_i w_{ki} + b_k\right) \quad (2.15)$$

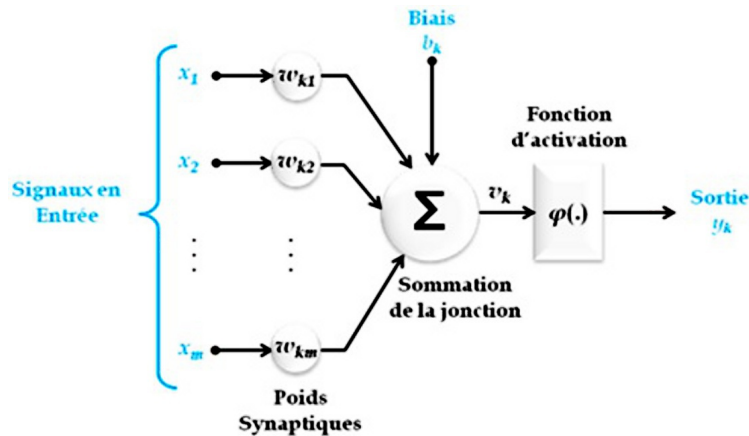


FIGURE 2.34 – Schéma fonctionnel d'un neurone artificiel (Hachem D., 2009).

La fonction d'activation peut prendre plusieurs formes, la plus simple étant la fonction linéaire (la sortie y_k est donc égale à la somme pondérée). Les différents types de fonctions d'activation connues sont reportées sur le tableau 2.3. Le choix du type de cette fonction est déterminé par le type de sortie désirée (binaire, sigmoïde, linéaire, etc.).

Nom de la fonction	Relation entrée/sortie
Seuil	$y_k = 0$ si $u_k < 0$
	$y_k = 1$ si $u_k \geq 0$
Seuil symétrique	$y_k = -1$ si $u_k < 0$
	$y_k = 1$ si $u_k \geq 0$
Identité	$y_k = u_k$
Linéaire saturée	$y_k = 0$ si $u_k < 0$
	$y_k = u_k$ si $0 \leq u_k < 1$
	$y_k = 1$ si $u_k \geq 1$
Linéaire saturée symétrique	$y_k = -1$ si $u_k < -1$
	$y_k = u_k$ si $-1 \leq u_k < 1$
	$y_k = 1$ si $u_k \geq 1$
Linéaire positive	$y_k = 0$ si $u_k < 0$
	$y_k = u_k$ si $u_k \geq 0$
Sigmoïde	$y_k = \frac{1}{1+e^{-u_k}}$
Tangente hyperbolique	$y_k = \frac{e^{u_k} - e^{-u_k}}{e^{u_k} + e^{-u_k}}$
Compétitive	$y_k = 1$ si $u_k \geq$ Valeur donnée
	$y_k = 0$ sinon

TABLEAU 2.3 – Liste des fonctions d’activation les plus utilisées

L’élément de base ainsi décrit, nous pouvons maintenant parler de *réseau* qui n’est ni plus ni moins qu’un ensemble de ces entités de base (neurone formel) connectées entre eux. Néanmoins, cette inter-connexion est déterminée par une architecture. Encore une fois, ils en existent de différents types suivant les différents buts recherchés d’un RN. Un RN artificiel est donc déterminé par deux paramètres importants ; son architecture et sa méthode d’apprentissage.

Dans cette thèse, nous avons utilisé les RNs pour la régression et l’interpolation d’images. Nous avons pour cela utilisé l’architecture la plus employée pour ces buts nommée le *Perceptron Multi-Couches* (PMC) (figure 2.35).

Comme son nom l’indique, le PMC est composé de plusieurs couches ; deux au moins :

- Une couche d’entrée du RN : elle est composée d’autant de neurones que de paramètres en entrée. Généralement, on ne parle pas de neurones pour cette couche mais on dit tout simplement *entrées* car il n’y pas de fonction appliquée à la valeur en entrée. On commence à numéroter les couches à partir de la première couche intermédiaire.
- Une ou plusieurs couches intermédiaires : chaque couche est composée d’un certain nombre de neurones. De nos jours, il est plutôt rare d’utiliser plusieurs couches intermédiaires pour un PMC simple mais juste une seul ; en effet, il a été prouvé qu’une seule couche cachée pour un PMC suffisait et que c’est le nombre de neurones dans cette couche qui reste à déterminer (Irie et Miyake, 1988; Hornik *et al.*, 1989; De Villiers et Barnard, 1993; Tamura et Tateishi, 1997).
- Une couche de sortie : composée d’autant de neurones que de paramètres en sortie (un seul

dans nos cas).

Les RNs de type multi-couches ont la propriété d'être des approximateurs universels. Cette propriété à été définie par Cybenko (1989) et Funahashi (1989) :

" Toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée uniformément, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables, par un réseau de neurones comportant une couche de neurones cachés en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation, et un neurone de sortie linéaire "

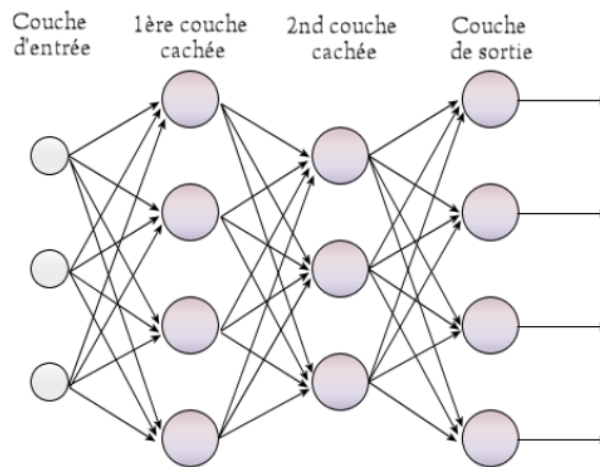


FIGURE 2.35 – Schéma d'un Perceptron Multi-Couches (à trois couches).

Comme pour le cerveau humain, le RN artificiel a besoin d'*apprentissage*, Cette apprentissage (*appr*) consiste à déterminer les valeurs des poids permettant à la sortie du RN d'être aussi proche que possible de l'objectif à atteindre, et cela en adaptant ces *poids synaptiques* (les poids des connexions).

On distingue trois grands types d'*appr* :

- Supervisé : où les entrées et les sorties désirées sont disponibles. Le RN s'adapte par comparaison entre le résultat calculé en fonction des entrées fournies, et la réponse attendue en sortie.
- Non-supervisé (dit *auto-organisationnel*) : où il n'y a de disponible que les entrées. Le réseau va se modifier en fonction des régularités statistiques de l'entrée et établir des catégories, en attribuant et en optimisant une valeur de qualité, aux catégories reconnues.
- Hybride : qui combine les deux types précédents.

Dans notre cas, nous sommes dans un problème de régression où les paramètres en entrée comme en sortie sont disponibles, nous appliquerons donc un *appr* supervisé donc une règle d'*appr* basée sur la correction d'erreurs. Cet *appr* se fera au moyen d'*algorithme* dit *backpropagation* (BP, par rétro-propagation) ; cela veut dire qu'il a deux choses à retenir :

- La direction de l'exécution du RN (pour estimer une sortie suivant une entrée donnée) se fait de la couche d'entrée vers la couche de sortie.
- La direction de l'apprentissage du RN se fait en sens inverse, c'est à dire que l'on adapte les poids en partant de la couche de sortie vers la couche d'entrée.

Dans le langage des réseaux de neurones, lorsqu'on parle de PMC qui utilise une règle d'*appr* par PB on dit qu'on fait face à réseau de type FeedForward Neural Network (FNN) ; cette notion regroupe ainsi l'architecture et la méthode d'apprentissage.

En ce qui concerne la méthode d'apprentissage par BP, il en existe plusieurs règles, celle que nous avons choisie pour nos expériences est donnée par le *Levenberg-Marquardt algorithm* (LMA), qui est destiné aux problèmes de minimisation de fonctions non linéaires et dépendantes de plusieurs variables. Les bases du LMA on été introduites par Levenberg (1944) puis Marquardt (1963), la description en détails de la méthode est présentée dans Madsen *et al.* (2004).

Bien que le LMA nécessite plus de mémoire que d'autres algorithmes, il reste fortement recommandé car c'est l'un des algorithmes de BP les plus rapides en exécution avec une complexité algorithmique d'ordre 2 (n^2 , voir l'annexe D.1 pour plus d'explications).

Nous avons choisi dans cette section de parler des RNs et plus précisément du PMC, nous avons aussi abordé l'apprentissage des PMC par BP que nous nommerons FNN dans la suite du manuscrit. Il existe néanmoins pleins d'autres types de RNs associés à pleins d'autres types d'apprentissages et d'applications. En annexe C.1, nous présentons un récapitulatif des différents types architectures et de règles d'apprentissages appropriées avec des exemples d'utilisation (Ladjaj, R., 2002).

2.3.4 Implémentation des méthodes

Afin de faciliter la compréhension de la suite des chapitres et les étapes suivies pour arriver à notre but, nous présentons dans cette sous-section l'implémentation développée pour chaque méthode lors de nos expériences. Nous présenterons donc le code source général, qui, suivant l'utilisation, sera adapté au problème.

2.3.4.1 La régression linéaire multiple

Comme vu précédemment, la régression linéaire multiple prend en paramètres d'entrées deux variables au moins, nous avons dans nos expériences utilisé un *toolbox* (boite à outils) qu'embarque la plateforme MATLAB[®] nommé *CFTool* pour Curve Fitting Tool (outil pour l'ajustement¹⁵ de courbes). Elle englobe aussi le toolbox *SFTool* pour *Surface Fitting Tool*.

Cette boite à outils offre une facilité d'utilisation pour appliquer une régression en utilisant la méthode des moindres carrés vu en section 2.3.1 et 2.3.2. On procède donc comme décrit dans le code source 2.6.

15. On peut aussi parler de régression ou d'approximation.

```

%Fonction qui prend en entrées la latitude, la température et la salinité
% et en sortie donne un modèle de RLM et les paramètres
% d'évaluations du modèle
function [fitresult, gof] = createFit(lat, temp, sal)
%On commence par lancer la fonction "prepareSurfaceData" qui transforme
% les données, si nécessaire comme suit:
% - Vérifie que les tableaux en entrée sont tous de la même taille.
% - supprime les lignes où un des trois tableau contient une valeur nulle.
% - supprime les valeurs redondantes si elles existent.
[xData, yData, zData] = prepareSurfaceData( lat, temp, sal );

% Paramétrage du type de régression; dans ce cas:
% - Un polynome en sorite
% - Premier paramètre au degré 1 et deuxième au degré 2
ft = fitttype( 'poly12' );
opts = fitoptions( ft );
opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [Inf Inf Inf Inf Inf];

% Lancement de la régression par méthode des moindres carrés
% avec le paramétrage précédent
[fitresult, gof] = fit( [xData, yData], zData, ft, opts );

% Pour plus de détails voir :
% http://fr.mathworks.com/help/curvefit/preparesurfacedata.html

```

CODE SOURCE 2.6 – Exemple d’une fonction pour l’application d’une régression linéaire multiple en utilisant la méthode des moindres carrés ; estimation de la salinité en utilisant la latitude et la température.

2.3.4.2 Feedforward Neural Network

Les Feedforward Neural Network (FNN) sont un type de réseau de neurones où l’architecture du RN est, comme décrit précédemment en section 2.3.3, composée de couches successives (une en entrée, une en sortie et une ou plusieurs intermédiaires), et où le mode d’apprentissage du réseau se fait par rétro-propagation de l’erreur soit en sens inverse de l’exécution.

Nous avons utilisé la méthode *Levenberg–Marquardt algorithm* (LMA) qui, comme pour le RLM est intégrée dans une boîte à outils dédiée aux RNs dans MATLAB[®] et nommée *NFTool* pour Neural Network Fitting Tool.

Le code source 2.7 décrit le paramétrage de base pour lancer un RN dans le but de faire une régression non-linéaire avec le LMA. Les valeurs par défaut du LMA sont données en annexe C.2.

```

%Soit une image sat nommé "Data" sous forme d'un tableau de type :
% |Latitudes/Longitude/Température|
inputs = [Data(:,1),Data(:,2)]'; % Entrée du RN
targets = Data(:,3)'; % Sortie désirée du RN

% Choix du nombre de neurones cachés
hiddenLayerSize = 5;
net = fitnet(hiddenLayerSize);
net.inputs{1}.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.outputs{2}.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Choix d'une partition aléatoire de données pour l'apprentissage:
net.divideFcn = 'dividerand';
net.divideMode = 'sample';
net.divideParam.trainRatio = 70/100;% - une partie pour l'apprentissage lui même 70%
net.divideParam.valRatio = 15/100;% - une partie pour la validation 15%
net.divideParam.testRatio = 15/100;% - une partie pour le test 15%

%Choix du type d'apprentissage du FNN, le LMA
net.trainFcn = 'trainlm';
%Plus d'informations sur le LMA :
% http://fr.mathworks.com/help/nnet/ref/trainlm.html

%Lancement de l'apprentissage
[net,tr] = train(net,inputs,targets);

%"net" est le FNN utilisé pour calculer les points manquants dans l'image
% en utilisant les latitudes et longitudes de ces derniers.
%Soit LatLon le tableau de toutes les latitudes et longitudes,
% La reconstruction de l'image se fait comme suit :
ImageSatReconstruite=[LatLon(:,1),LatLon(:,2),(net([LatLon(:,1),LatLon(:,2)]'))')];

% La régression étant non-linéaire, il peut y avoir des valeur abérantes , surtout
%si le nombre de neurones cachés augmente, nous avons donc choisi de les éliminer
%en gardant les valeurs comprises entre le min et le max des valeurs d'apprentissage:
ImageSatReconstruite = ...
ImageSatReconstruite (ImageSatReconstruite(:,3)<=max(Data(:,3)) ...
& ImageSatReconstruite(:,3)>=min(Data(:,3)),:);

%Pour plus d'informations :
% http://fr.mathworks.com/help/nnet/gs/fit-data-with-a-neural-network.html

```

CODE SOURCE 2.7 – Exemple d'application d'une régression non-linéaire en utilisant un RN de type FNN avec la méthode d'*appr* LMA pour l'interpolation de points manquants d'une image satellite.

2.4 Paramètres d'évaluation

Pour évaluer un modèle, qu'il soit issu d'une régression linéaire multiple ou d'un réseau de neurones, nous avons choisi de prendre en considération les paramètres suivants lors de nos tests (n est le nombre de points et e_i l'erreur d'estimation correspondante au point i) :

- La moyenne des erreurs, notée MBE pour *Mean Bias Error* :

$$MBE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i \right] \quad (2.16)$$

Ce paramètre représente une moyenne simple des erreurs et nous informe sur le biais moyen du modèle entre les valeurs espérées et les valeurs estimées.

- La moyenne des valeurs absolues des erreurs, notée MAE pour *Mean Absolute Error* :

$$MAE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |e_i| \right] \quad (2.17)$$

Ce paramètre nous informe sur le niveau où l'amplitude moyenne des erreurs¹⁶, ainsi un MAE élevé correspond à des erreurs élevées et vice-versa ; à la différence du MBE où les erreurs positives et négatives peuvent s'annuler, le MAE met en évidence l'amplitude de l'erreur moyenne.

- La moyenne des carrés des erreurs, notée RMSE pour *Root Mean Square Error* :

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.18)$$

Le RMSE est le paramètre qui nous informe sur l'intervalle d'erreur du modèle, par exemple, si on a un RMSE de 0,2 et que le modèle estime à paramètre $\lambda = 23$ unité, on dira que la valeur estimée est de $23 \pm 0,2$ unité. C'est donc ce paramètre que nous avons choisi pour déterminer la précision de l'estimation d'un modèle donné.

- En plus des trois paramètres précédents, nous calculerons aussi le pourcentage de perte de points de comparaison qui représentent la proportion de points *in situ* qui n'ont pas de points *sat* correspondants.

16. Il ne faut pas faire la confusion avec la Valeur absolue des écarts (déviations absolues moyennes ou simplement déviations moyennes), notée MAD pour Mean Absolute Deviation, et qui correspond au niveau moyen des écarts par rapport à la moyenne d'un paramètre donné. Le MAD est un paramètre statistique utilisé en analyse de données, l'équation est notée : $MAD = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \bar{y}| \right]$ avec \bar{y} la moyenne.

Après avoir décrit notre zone d'étude, nous avons abordé dans ce chapitre, l'analyse des paramètres océanographiques, tel que la SST, la SSS, la chlorophylle, la vitesse du vent et la fugacité du CO_2 dans l'eau et dans l'air. Cette analyse s'est faite premièrement en utilisant les données *in situ* issus de programmes différents mais opérant sur le même bateau (MINERVE, SURVOSTRAL et IMOS sur L'Astrolabe), et par la suite, nous avons décrit les satellites dont on a pu utiliser les données et faire la même analyse des paramètres disponibles. Nous avons aussi pu mettre en avant les codes sources développés pour la lecture et l'exploitation de ces données *sat* (avec la suite des codes utilisés dans l'annexe D).

Dans une troisième partie de ce chapitre, nous avons abordé les différentes méthodes utilisées dans nos expérimentations tel que la régression linéaire et les réseaux de neurones. Nous avons aussi, vers la fin, donné un exemple d'utilisation de chacun d'entre eux.

Ce chapitre se conclut par la présentation de tout ce dont nous avons eu en main comme données, ainsi que la description des méthodes appliquées à ces données, cela, pour permettre leur utilisation dans cette étude et dans les expérimentations présentées dans la suite de cette thèse.

Chapitre 3

CONTRIBUTION A L'ESTIMATION DE LA SALINITÉ

Dans ce chapitre, nous entamons la partie pratique de nos expérimentations en commençant par l'estimation de la SSS. Si nous avons choisi d'estimer la SSS c'est premièrement dû au manque de données *sat* sur ce paramètre tout le long de notre échelle de temps (de 2002 à 2015) ; les satellites existants de nos jours et donnant une estimation de la SSS n'ont commencé à être opérationnels qu'en novembre 2009 pour SMOS (chapitre 2, section 2.2.1.3) et juin 2011 pour AQUARIUS¹ (chapitre 2, section 2.2.1.2). Une autre différence de taille qui nous a poussé à avoir la SSS par d'autres satellites tel que MODIS_{Aqua}, est le fait que ce dernier offre une résolution beaucoup plus grande², et donc une distribution plus précise de la variation de la SSS sur la radiale Hobart-DDU. Nous verrons aussi par la suite que ce choix d'utilisation d'images *sat* de MODIS_{Aqua} pour l'estimation de la SSS s'est avéré, en plus des avantages cités précédemment, une véritable alternative qui offre une estimation plus précise (une erreur d'estimation moindre).

Avant d'entamer l'approche choisie et développée dans ce chapitre, nous devons préciser que l'estimation de la SSS s'est faite en deux fois ; c'est à dire :

1. Une première fois avec les données *in situ* de MINERVE combinées avec les données d'IMOS. N'ayant au début de la thèse que des données MINERVE entre 2002/2003 et 2008/2009 et des données d'IMOS entre 2008/2009 et 2012/2013, nous avons fusionné les données de SST et de SSS des deux bases car les données d'IMOS sont en plus grand nombre.
2. Une deuxième expérience, et dans laquelle nous avons recommencé tout les calculs (vers mars 2016), s'est faite après réception des données SURVOSTRAL qui avaient l'avantage de couvrir une échelle de temps et d'espace plus grande qu'IMOS et MINERVE réunis, mais aussi une SSS qui avait été calibrée et corrigée (les données MINERVE de SSS étant non corrigées).

Nous allons donc dans un premier temps présenter l'approche sur laquelle nous nous sommes

1. D'autres produits mêlant données *sat* et *in situ* sont disponibles dans certaines régions et dans certaines périodes, mais notre but n'était de se baser que sur des données *sat* tel que disponibles en ligne sans aucune modification par tel ou tel algorithme.

2. Pour rappel, MODIS_{Aqua} propose une résolution de 4 km×4 km au lieu de ~25 km×25 km et ~150 km×150 km pour SMOS et AQUARIUS respectivement.

basés pour avoir la SSS, et ce, avec les données de MINERVE et IMOS fusionnées. Cette première approche s'est faite sur la première rotation R0, et c'est sur ces résultats qu'un premier article a été publié. Forte heureusement, la différence entre les données de R0 avant et après correction de la SSS n'ont pas affecté de façon significative les résultats de notre article, et n'ont donc pas remis en question les conclusions retenues (une différence de précision de l'ordre de 0.01).

Dans un deuxième temps, nous allons généraliser notre solution ; cette fois en repartant sur les données de SSS corrigées et sur les trois rotations. Nous verrons alors les résultats des modèles définitifs que nous avons développé pour l'estimation de la SSS par les données *sat* de MODIS_{Aqua}.

3.1 Première approche

Afin d'estimer la SSS, il a fallu choisir un paramètre qui vérifie deux choses ; la première est qu'il ait la propriété d'avoir une relation forte avec la SSS, et la deuxième, est qu'il soit disponible par satellite, tout le long du trajet Hobart-DDU et couvrant la période de l'été austral entre 2002 et 2013 au moins. Le choix évident s'est donc porté sur la *SST* comme paramètre, et plus précisément sur celle produite par MODIS_{Aqua}.

Dès le début, nous avons choisi de diviser notre travail sur les trois rotations du printemps à l'été austral. Ceci revient à diviser la période en trois parties correspondantes aux trois rotations ; cela en suivant la distribution temporelle des données MINERVE et IMOS vues en figures 2.2 et 2.6 respectivement (chapitre 2, section 2.1.1.1 et 2.1.1.3) donc R0 pour le début de la période (de mi-octobre à mi-décembre), R2 de mi-décembre à début-février et R4 la fin de la période (du début-février à début-mars).

Le choix de ne pas prendre la base toute entière en une seule fois avec un seul modèle pour toute la période s'est fait sur la base de l'analyse du comportement de la SST et de la SSS du printemps à l'été austral³. Pour rappel, nous avons remarqué lors de notre analyse des données *in situ* (chapitre 2, section 2.1.2.2) que la SSS avait une distribution différente de R0 à R4 que cela soit au nord du front polaire avec une pente différente pour chaque rotation, mais aussi au sud du front polaire, où même si la SSS a tendance à se stabiliser jusqu'aux côtes antarctiques, celle-ci n'avait pas les mêmes valeurs.

En plus de la SST, un autre paramètre devait être pris en considération ; ce paramètre devait introduire dans le modèle l'information sur les fronts tout au long de radiale Hobart-DDU. Pour représenter cette information, nous avons choisi d'inclure dans l'entrée du modèle la *Latitude* qu'on notera *lat* ; en effet, la *lat* permet d'avoir une information sur le positionnement spatiale de chaque point du modèle par rapport à la SST et la SSS de ce même point. Ainsi, notre but était de trouver un modèle qui prenait en entrée la SST et la *lat*, et en sortie, donnait la SSS.

Dans cette première approche, nous avons fait tous nos essais sur la rotation R0 qui, par la suite et en vu des résultats obtenus, nous a permis de publier un article portant sur ces résultats ;

3. Nous avons tout de même, et pour des raisons purement expérimentales, essayé d'avoir un seul modèle pour les trois rotations mais cela s'est dès le début avéré impossible avec un modèle qui produisait des erreurs trop importantes dus à la différence entre les valeurs que prend la SSS au fil de la période étudiée.

cet article est à retrouver dans son intégralité dans le chapitre A section A.1.1.

Nous avons utilisé la régression linéaire multiple (RLM, chapitre 2, section 2.3.2) afin de trouver une équation empirique qui relie la SSS aux deux paramètres en entrée, la SST et la *lat*. Le degré de cette équation pour chaque paramètre en entrée a été choisi de façon expérimentale ; c'est à dire que nous avons fait varier le degré de polynôme de 0 à 5 pour la SST et la *lat* jusqu'à ce que l'augmentation du degré n'apporte plus d'amélioration au polynôme ; ainsi nous avons pu constater que le meilleur résultat pour la création du modèle était atteint avec une latitude au degré 1 et une température au degré 2. Si l'on regarde la figure 3.1, ceci peut s'expliquer par le fait que vis-à-vis de la SSS, la SST prend une tendance parabolique, l'augmentation du degré de la latitude quant à lui n'apporte pas plus d'information sur le positionnement spatial des échantillons.

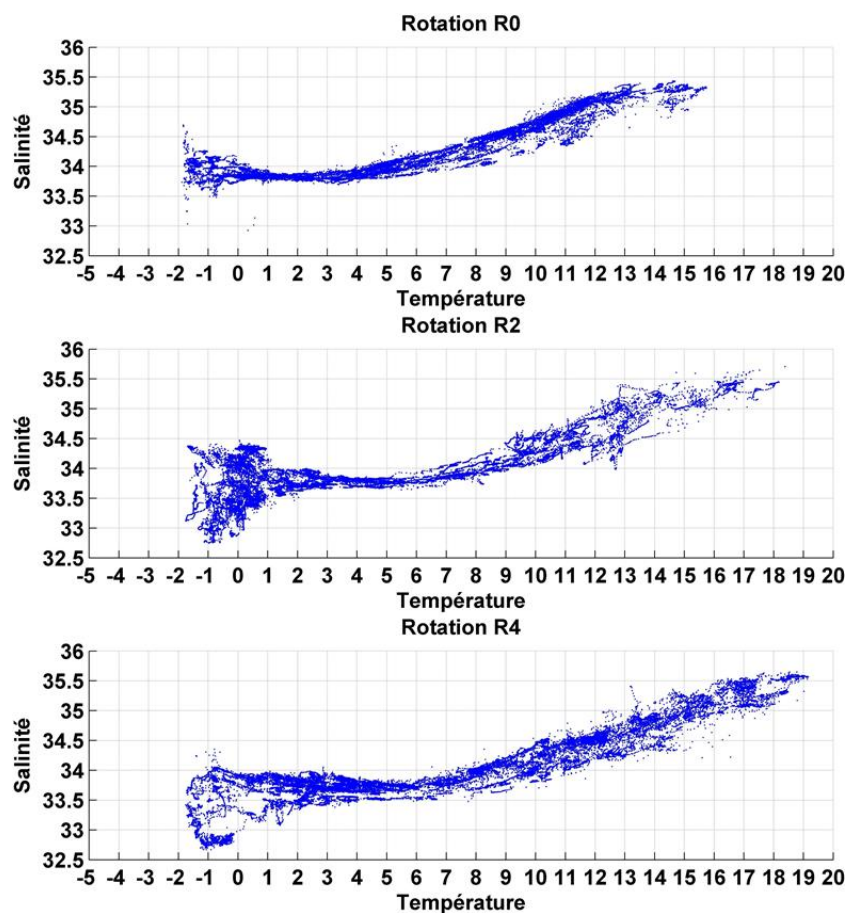


FIGURE 3.1 – Relation entre la température et la salinité pour les trois rotations.

Nous allons donc montrer en détails comment nous avons procédé pour estimer la SSS en R0, par la suite, nous verrons en section 3.2 la généralisation de cette solution sur toute la saison et avec les données corrigées de SURVOSTRAL.

Nous avons eu en notre possession, pour R0, les données MINERVE et IMOS que nous avons fusionné pour former une base de données entre 2002 et 2012, cette base a ensuite été divisée en deux parties ; une première pour créer le modèle et une deuxième pour valider le modèle. Par la suite, et pour tester le modèle, nous nous sommes basés sur cette deuxième partie afin de trouver les points *sat* correspondants. Cette partition s'est faite de façon à avoir un nombre de points conséquent dans les deux phases tout en gardant une distinction entre les deux. Le tableau 3.1 présente cette partition.

Partie	année	Nombre de points	Total
1	2002	294	14203
	2003	388	
	2004	421	
	2005	470	
	2006	201	
	2007	348	
	2008	4410	
	2009	7671	
2	2010	11045	21395
	2011	4181	
	2012	6169	

TABLEAU 3.1 – Partitionnement de la base de données pour la création, la validation et le test du modèle de salinité pour R0, la partie 1 est utilisée pour créer modèle et la partie 2 pour la validation et le test.

Pour créer le modèle, nous avons implémenté notre solution suivant le code présenté précédemment (chapitre 2, code source 2.6), le modèle obtenu ainsi que les résidus sont présentés dans la figure 3.2. On remarque que le modèle est représenté sous forme d'une surface parabolique (équation 3.1). Les résidus sont concentrés au niveaux des deux côtes ; plus encore au sud du fait de SSS qui oscille à cause de l'eau douce provenant de la fonte des glaces. Pour la création de ce modèle nous avons obtenu un coefficient de corrélation élevé, soit un $R = 0,95$. L'équation 3.1 présente la relation trouvée entre la SSS et les deux paramètres en entrée ; la SST et la *lat*.

$$SSS = a + b \times lat + c \times SST + d \times lat \times SST + e \times SST^2 \quad (3.1)$$

avec $a = 33,10000$, $b = -0,01257$, $c = 0,103600$, $d = 0,001929$ 116 et $e = 0,008504$.

Après l'étape de la création du modèle, vient la validation et le test ; nous appelons *validation* l'exécution du modèle avec les données *in situ* de la deuxième partie et *test* l'exécution du modèle en utilisant les données *sat* correspondantes aux données *in situ* de cette même deuxième partie (de validation). Comme cité précédemment, nous avons choisi d'utiliser la SST de MODIS_{Aqua} qu'on notera SST_{MODIS_a}.

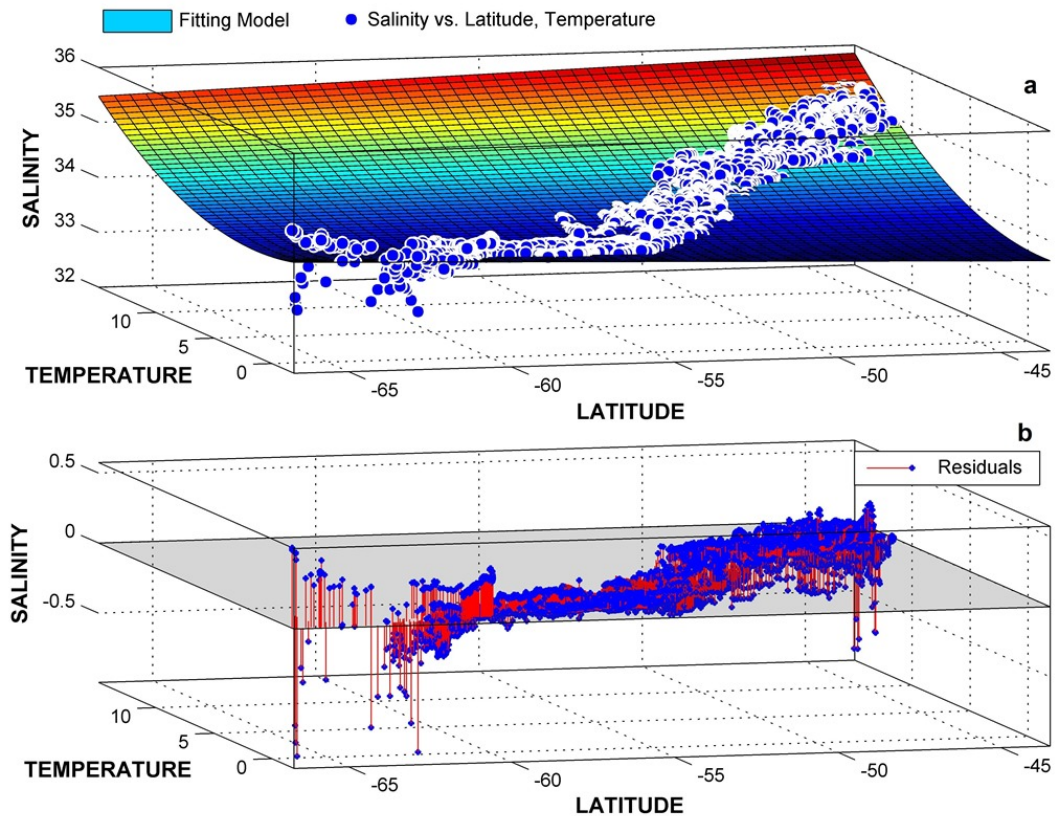


FIGURE 3.2 – Modèle d'estimation de la salinité par la température et la latitude obtenue en appliquant une RLM avec MATLAB®.

Après récupération des données *sat* correspondants (chapitre 2, code source 2.4), nous estimons la SSS en utilisant la *lat* et la SST_{MODIS_a} . Ces premiers résultats sont résumés dans le tableau 3.2, la figure 3.3 présente les résidus de température (la différence entre température *in situ* et *sat*) ainsi que les erreurs obtenues lors des tests (différence entre la SSS estimée avec les données *sat* et la SSS *in situ*).

À première vue, on pourrait dire que ce résultat, avec un RMSE de 0,21 pour les données *in situ* et 1,55 pour les données *sat*, est trop élevé pour une estimation de SSS, mais si l'on regarde la différence entre la température *in situ* et *sat*, on remarque vite qu'à certains endroits, la température *sat* prend des valeurs erronées (dans le SAZ et le PFZ) ce qui entraîne automatiquement des erreurs d'estimation de la SSS (figure 3.3).

Zone	Validation			Test		
	MBE	MAE	RMSE	MBE	MAE	RMSE
STZ	0,0001	0,1763	0,2776	-0,4812	0,6958	1,3225
SAZ	-0,0223	0,3183	0,4296	-1,0521	1,7228	2,5537
PFZ	-0,1092	0,1387	0,2270	-1,7291	1,8288	2,7897
POOZ	-0,0383	0,0577	0,0881	-0,4094	0,4611	0,6962
SIZ	-0,0758	0,0781	0,1102	-0,5322	0,5390	0,6064
Toute la radiale	-0,0466	0,1174	0,2119	-0,6952	0,8504	1,5500

TABLEAU 3.2 – Résultats de la modélisation de la salinité pour R0.

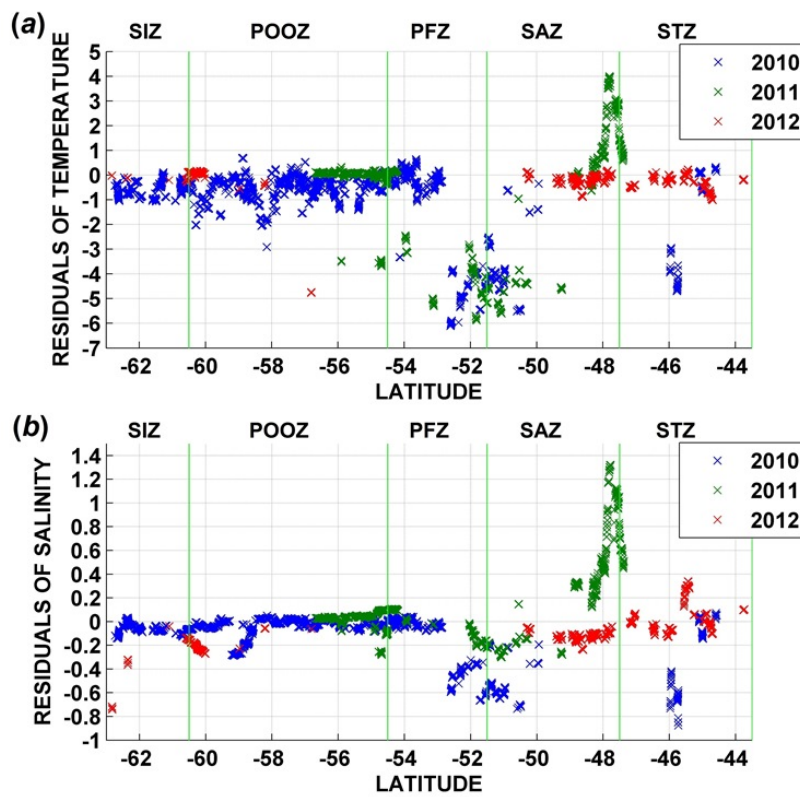


FIGURE 3.3 – Distribution latitudinale des erreurs pour la modélisation de la salinité en R0, (a) : Résidus de température *sat* (différence entre température *in situ* et *sat*), (b) : Résidus de l'estimation de la salinité (différence entre la salinité estimée avec les données *sat* et la salinité *in situ*).

Afin de voir plus précisément si notre modèle estime bien la SSS, et que les erreurs obtenues lors de cette première expérience sont dues à la SST_{MODIS_a} , nous avons choisi d'éliminer les valeurs aberrantes (dite *outliers*, $-1 \geq \text{résidu} \geq 1$) et corriger le biais de $-0,6952$ obtenu. Les nouveaux résultats sont présentés dans le tableau 3.3 et la figure 3.4.

Zone	Validation			Test		
	MBE	MAE	RMSE	MBE	MAE	RMSE
STZ	0,0969	0,1193	0,1805	0,1089	0,2923	0,3701
SAZ	0,0200	0,1480	0,2023	0,1457	0,2901	0,4001
PFZ	0,0268	0,0435	0,0567	0,2168	0,3197	0,3745
POOZ	-0,0314	0,0578	0,0890	0,0218	0,3077	0,3837
SIZ	-0,0863	0,0872	0,1187	0,2348	0,3054	0,3735
Toute la radiale	-0,0180	0,0741	0,1160	0	0,3058	0,3822

TABLEAU 3.3 – Résultats de la modélisation de la salinité pour R0 (après élimination des outliers et correction du biais).

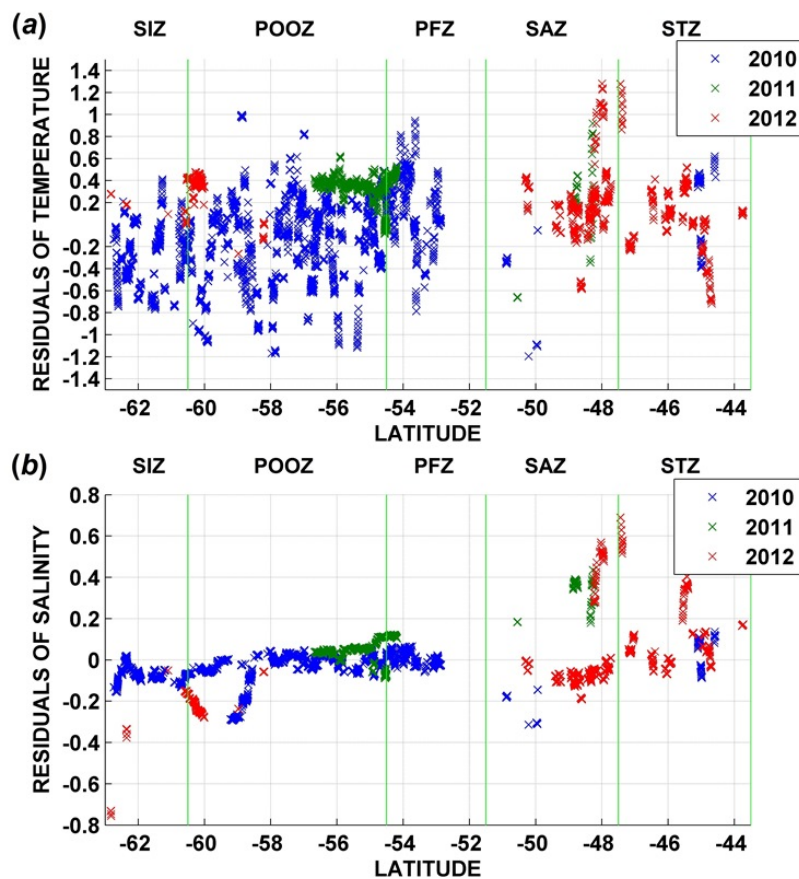


FIGURE 3.4 – Distribution latitudinale des erreurs pour la modélisation de la salinité en R0 (Après élimination des outliers et correction du biais), (a) : Résidus de température *sat* (différence entre température *in situ* et *sat*), (b) : Résidus de l'estimation de la salinité (différence entre la salinité estimée avec les données *sat* et la salinité *in situ*)

Après ces nouveaux tests, nous avons conclu que notre modèle avait une précision de $\sim 0,12$ face aux données *in situ* et $\sim 0,38$ face aux données *sat*. On remarque certes, une amélioration des résultats, mais notre but est d'avoir une bonne estimation de la SSS en utilisant les données *sat*. Or, le RMSE obtenu reste assez élevé. Néanmoins, pour prouver que même avec cela, notre approche reste meilleure par rapport aux données *sat* de SSS proposées dans cette région par les deux satellite SMOS (SSS_{SMOS}) et AQUARIUS ($SSS_{AQUARIUS}$), nous avons fait un autre test de comparaison où :

1. On fait une intersection des points *sat* entre MODIS et SMOS et on compare les deux SSSs (SSS_{SMOS} et celle estimée par SST_{MODIS_a}).
2. On fait une intersection des points *sat* entre MODIS et AQUARIUS et on compare les deux SSSs ($SSS_{AQUARIUS}$ et celle estimée par SST_{MODIS_a}).

Les résultats de ce test sont présentés dans le tableau 3.4. On remarque que quelque soit le satellite, la SSS obtenue par notre approche reste meilleure que celles de SSS_{SMOS} ou de $SSS_{AQUARIUS}$. La figure 3.5 présente un exemple de comparaison entre la SSS estimé par SST_{MODIS_a} et celle produite par SMOS et AQUARIUS, nous remarquons aussi bien la différence entre la couverture spatiale des trois satellites ainsi que leurs résolutions.

En conclusion à cette première expérimentation sur la modélisation de la SSS, plusieurs remarques sont à notées afin d'améliorer et de généraliser cette solution ; nous pouvons en outre mettre en évidence les faits suivants :

- Les dernières recherches présentent la SSS estimée par *sat* comme ayant une précision d'environ 0,3 à 0,4 dans les régions tropicales et $\sim 0,5$ dans les région froides (Boutin *et al.*, 2013). Nos résultats sont certes de cet ordre (même un peu mieux) mais cela nous pousse à améliorer de plus en plus notre RMSE.
- Le pourcentage de perte de points de comparaison est très élevé ; on se retrouve donc avec des années où les données *sat* de température d'une journée ne sont disponibles que dans certaines zones, d'où une comparaison incomplète. Ceci nous pousse à trouver le moyen d'avoir plus de données *sat* pour la comparaison.

Ce premier travail sur la salinité a fait l'objet d'un article publié (Benallal *et al.*, 2016a) et présenté dans le chapitre A, section A.1.1.

Nous avons présenté dans ce titre comment nous avons procédé pour estimer la SSS en partant de données *sat* de température d'une journée, nous avons montré en détails notre approche et comment nous avons procédé pour améliorer nos résultats, néanmoins, il reste à proposer une généralisation de cette solution sur toute la période (de R0 à R4), mais aussi trouver un moyen d'avoir plus de données *sat* sur la région étudiée. Dans la section 3.2 nous expliquerons en détails ces aspects.

	SSS estimée vs. SSS _{SMOS}	SSS estimée vs. SSS _{AQUARIUS}
RMSE de la SSS estimée	0.1841	0.0755
RMSE de la SSS par le satellite correspondant	1.9781	0.4989

TABLEAU 3.4 – Comparaison entre la salinité estimée par SST_{MODIS_a} (SSS estimée) avec les deux produits de salinité *sat* (SMOS et AQUARIUS).

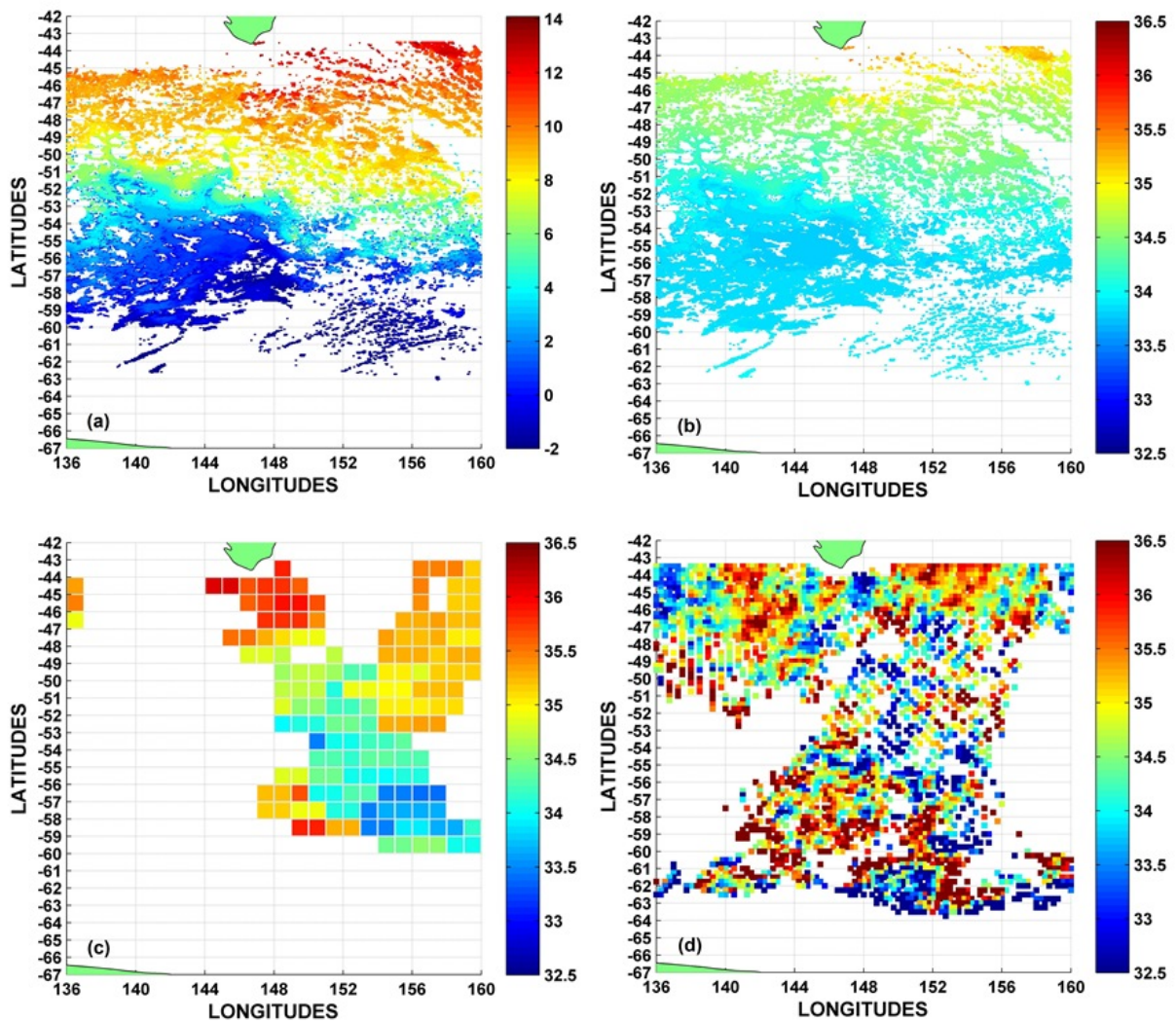


FIGURE 3.5 – Exemple de comparaison de la salinité estimée en utilisant la SST_{MODIS_a} avec les données de SMOS et AQUARIUS, (a) : SST_{MODIS_a} dans le sud de l'Australie le 25/10/2011, (b) : la salinité estimée de (a) par le modèle, (c) : image satellite d'AQUARIUS le 25/10/2011, (d) : image satellite de SMOS du 25/10/2011 au 27/10/2011 (résolution temporelle minimum de trois jours).

3.2 Généralisation de la solution

Dans le premier titre de ce chapitre, nous avons vu les bases de notre approche pour l'estimation de la SSS par SST_{MODIS_a} . Nous avons présenté nos résultats en discutant les points à améliorer. Dans ce titre, nous allons généraliser notre solution sur toute la période du printemps à l'été austral.

Le problème majeur auquel nous avons fait face lors de l'utilisation de SST_{MODIS_a} avec des images d'une journée était la faible quantité de points de comparaison avec les données *in situ* (même si ces images étaient plus complètes que des images de SSS_{SMOS} et $SSS_{AQUIRIUS}$). Pour palier à ce problème deux solutions se sont présentées à nous :

1. Prendre les images de SST_{MODIS_a} d'une journée et les interpoler pour compléter les zones sans données. Pour cela nous avons proposer deux méthodes, l'une basé sur la RLM et l'autre sur les RNs de type FNN.
2. Utiliser des images non plus d'une journée, mais passer à une échelle plus élevée. Pour cela, nous avons utilisé les images de SST_{MODIS_a} composites de 8 jours (vues en chapitre 2, section 2.2.1.1) qui, comme cité précédemment, sont une représentation sur 8 jours de la température où l'on considère que chaque journée incluse est représentée par cette image.

3.2.1 Interpolation d'images *sat* part RLM

Pour interpoler une image en utilisant la RLM, nous avons mis en place un programme itératif qui, pour chaque image de SST_{MODIS_a} d'une journée, fait une reconstruction de cette dernière en créant un modèle pour chacune d'entre elles (voir l'annexe D.2 pour le code source). Ainsi, pour l'entrée du modèle, on prend en considération la latitude et la longitude, et comme sortie la température. Chaque image *sat* d'une journée a donc un modèle qu'on utilise pour créer une image dite *image reconstruite*.

La figure 3.6.b présente un exemple d'interpolation d'images *sat* de température avec la RLM, et cela dans les trois cas rencontrés lors de cette expérience ; en effet nous avons eu à interpoler des images qu'on a catégorisées comme suit :

- Des images avec très peu de données (première ligne dans la figure 3.6).
- Des images moyennement fournies en données (deuxième ligne dans la figure 3.6).
- Des images assez fournies en données (troisième ligne dans la figure 3.6).

3.2.2 Interpolation d'images *sat* par FNN

Nous avons pour cette fois-ci, et comme pour les RLM, mis en place un programme itératif qui, pour chaque image de SST_{MODIS_a} d'une journée, fait une reconstruction de cette dernière en créant un RN pour chacune d'entre elles (voir l'exemple du code source 2.7 vu en section chapitre 2, section 2.3.4.2). Nous avons utilisé un FNN pour effectuer cette tâche avec 5 neurones dans la couche cachée (afin d'éviter un FNN trop complexe, voir l'annexe C.3 pour plus d'explications).

L'entrée du FNN est composée de deux neurones ; un pour la *lat* et un deuxième pour la longitude (*lon*), et un neurone en sortie correspondant à la SST. La figure 3.6.c présente un exemple d'interpolation d'images *sat* de température avec les FNNs (pour les trois cas décrits dans la section 3.2.1).

On voit comment réagissent les deux méthodes face à plus ou moins de données dans l'image source ; le point commun étant qu'il ne fait aucun doute sur le fait que plus l'image source de SST_{MODIS_a} ait fourni plus l'interpolation (par RLM ou FNN) est correcte et fiable.

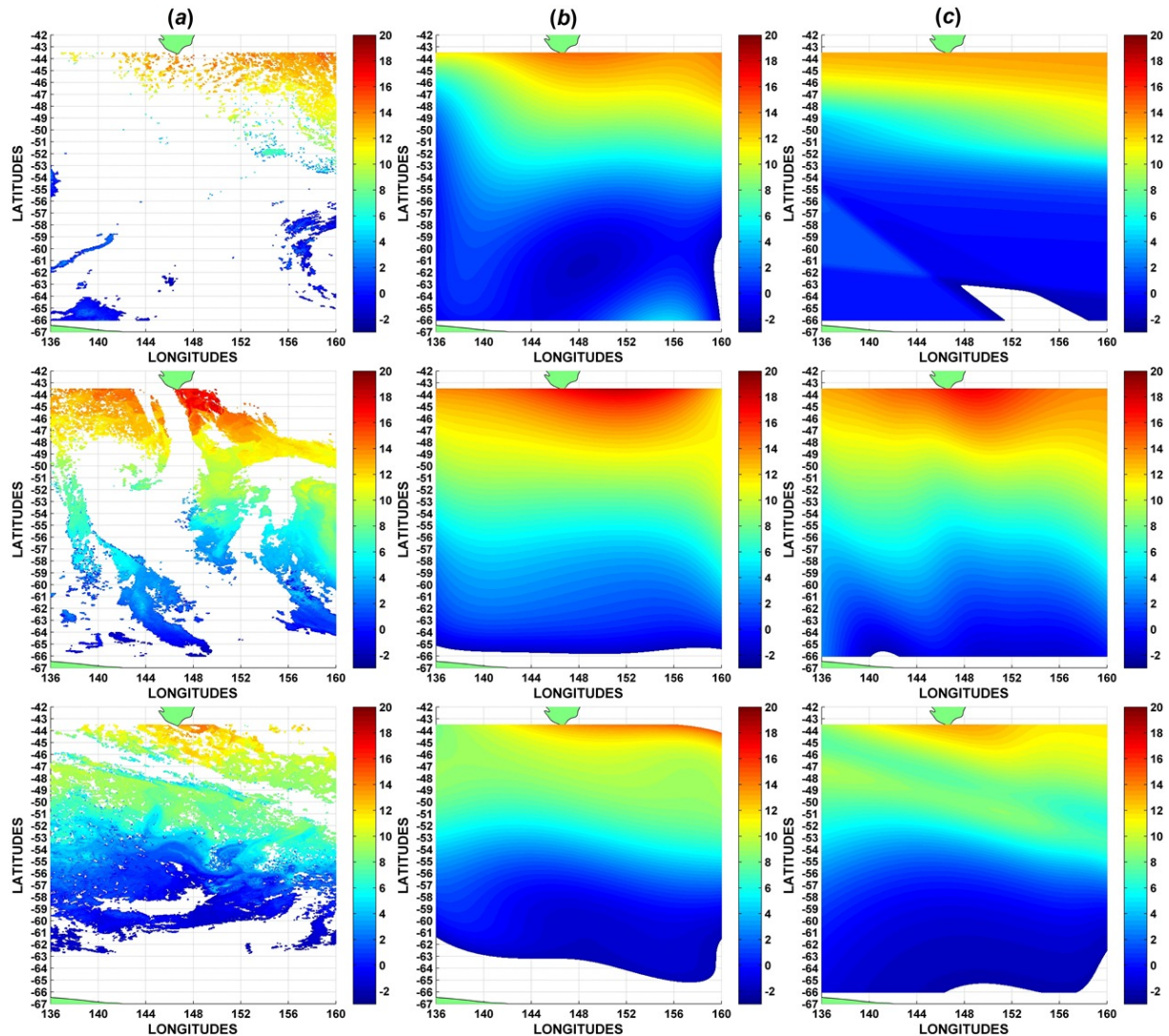


FIGURE 3.6 – Exemples d'interpolation d'images *sat* de température en utilisant la RLM et les RNs, (a) : Image *sat* de température telle que distribuées en ligne (dates : 02/01/2009, 28/01/2013 et 22/10/2011 respectivement pour la première, la deuxième et la troisième ligne), (b) : Interpolation de l'image *sat* en utilisant la Régression Linéaire Multiple (polynôme de degré 5), (c) : Interpolation de l'image *sat* en utilisant un réseau de neurones (FNN avec 10 neurones dans la couche cachée).

Après avoir interpolé les images *sat* d'une journée, nous avons aussi pris en considération les images *sat* composite sur 8 jours, ces quatre types d'images en main (une journée, une journée interpoler avec la RLM, une journée interpoler avec un FNN et une image composite sur 8 jours), nous avons procédé à la suite de l'expérience (E1 à E4 respectivement aux quatre types d'images); c'est à dire la comparaison des résultats de l'estimation de la SSS.

3.3 Modèles et résultats finaux

À ce niveau, nous allons reprendre tous les calculs pour mettre en place des nouvelles équations pour chaque rotation. En effet, comme nous l'avons précédemment expliqué, nous avons reçu les données de SSS corrigées en Mars 2016. Ces données de salinité du programme SURVOSTRAL ont été présentées en chapitre 2 section 2.1.1.2. Comme dans notre première approche, nous allons repartir sur cette nouvelle base en la divisant en deux parties afin d'avoir autant de points pour la modélisation et la validation puis le test. Le tableau 3.5 présente cette nouvelle division les données sur lesquelles nous somme repartis pour l'estimation de la SSS. Les trois équations produites pour chaque rotation sont présentées en annexe E.1.

Parie	R0	R2	R4	Total
Création des Modèles (de 2002/2003 à 2007/2008)	75703	86949	71713	234165
Validation des Modèles (de 2008/2009 à 2014/2015)	94993	94532	101773	291298

TABLEAU 3.5 – Nombre de points pour la création et la validation des nouveaux modèles d'estimation de la salinité après division de la base de données SURVOSTRAL (données de SSS corrigées).

Pour comparer et prendre le meilleur choix, nous avons évalué les résultats suivant les paramètres d'erreurs décrits précédemment dans le chapitre 2, section 2.4. Les résultats obtenues sont résumés dans le tableau 3.6.

Notre choix se base donc sur les quatre critères du tableau 3.6, et donc ce choix s'est finalement porté sur les images composites de 8 jours (E4) car elles représentent le meilleur compromis entre les quatre expériences; les raisons sont les suivantes :

- La MBE informe sur le biais que comporte le modèle et dans notre cas, il est à son minimum et dans le même ordre que E1.
- Le MAE, qui informe sur le niveau moyen des erreurs, est à son minimum dans E4.
- Le RMSE, qui est le paramètre d'erreur le plus important, est également à son minimum dans E4. Il donne à la précision du modèle (soit ± 0.16 pour nos résultats en utilisant les données *sat*). Même en comparant le RMSE des trois rotations une par une ceux de E4 reste les meilleurs par rapport à E1, E2 et E3.
- Le pourcentage de données perdues représente la proportion de données *in situ* qui n'a pas de points de données correspondant par satellite (en même temps et au même endroit). Nous voyons clairement dans E1 que l'utilisation des données *sat* d'un jour provoque un

important manque de données comparables et que, même si l'erreur quadratique moyenne de E1 était meilleure que celle de E4, ce RMSE de E1 resterait non-représentatif des variations spatio-temporelles de la salinité sur toute la zone étudiée, c'est d'ailleurs la critique qui nous a poussé à trouver un autre moyen d'avoir plus de données *sat*. Le pourcentage de 13 % et 9 % pour les deux techniques d'interpolation sont faibles, mais on remarque une augmentation du RMSE dans les deux. Les 51% en E4 nous semble être une perte acceptable qui n'a pas d'effets significatifs sur la distribution spatiale et temporelle des données et donc sur le modèle. En effet, même si cette proportion représente la moitié de la base initiale, nous avons remarqué que les images composites de 8 jours permettent d'avoir une couverture spatiotemporelle sur toute la région étudiée .

		MBE			MAE			RMSE			% Perte de données		
		R0	R2	R4	R0	R2	R4	R0	R2	R4	R0	R2	R4
E1	V.	-0,04	-0,06	-0,02	0,12	0,14	0,14	0,18	0,19	0,20	94	89	93
	G.		-0,03			0,13			0,19			92	
E2	V.	-0,07	-0,02	-0,03	0,16	0,17	0,16	0,23	0,24	0,24	17	10	11
	G.		-0,04			0,16			0,24			13	
E3	V.	-0,09	-0,03	0,04	0,15	0,18	0,16	0,21	0,28	0,24	10	9	7
	G.		-0,05			0,16			0,24			9	
E4	V.	-0,05	-0,02	-0,02	0,13	0,11	0,11	0,17	0,17	0,15	57	44	51
	G.		-0,03			0,12			0,16			51	

TABLEAU 3.6 – Résultats de la génération de l'estimation de la salinité en utilisant différents types d'images, E1 : Image d'une journée, E2 : Interpolation d'une image d'une journée avec la RLM, E3 : Interpolation d'une image d'une journée avec un FNN, E4 : Image composite sous 8 jours, V : Valeur, G : Résultat global en prenant les trois rotations en considération.

Effectivement, si l'on regarde la figure 3.7, on remarque clairement que les images composites sur 8 jours restait celles qui couvrait assez bien la région tout en restant le plus proche des variations réelles que peut prendre la SST, ceci à donc eu pour effet d'avoir une meilleure estimation de la SSS par satellite avec une précision de l'ordre de 0,16. Tout les détails des résultats concernant cette expérience sont présentées dans l'annexe E.2.

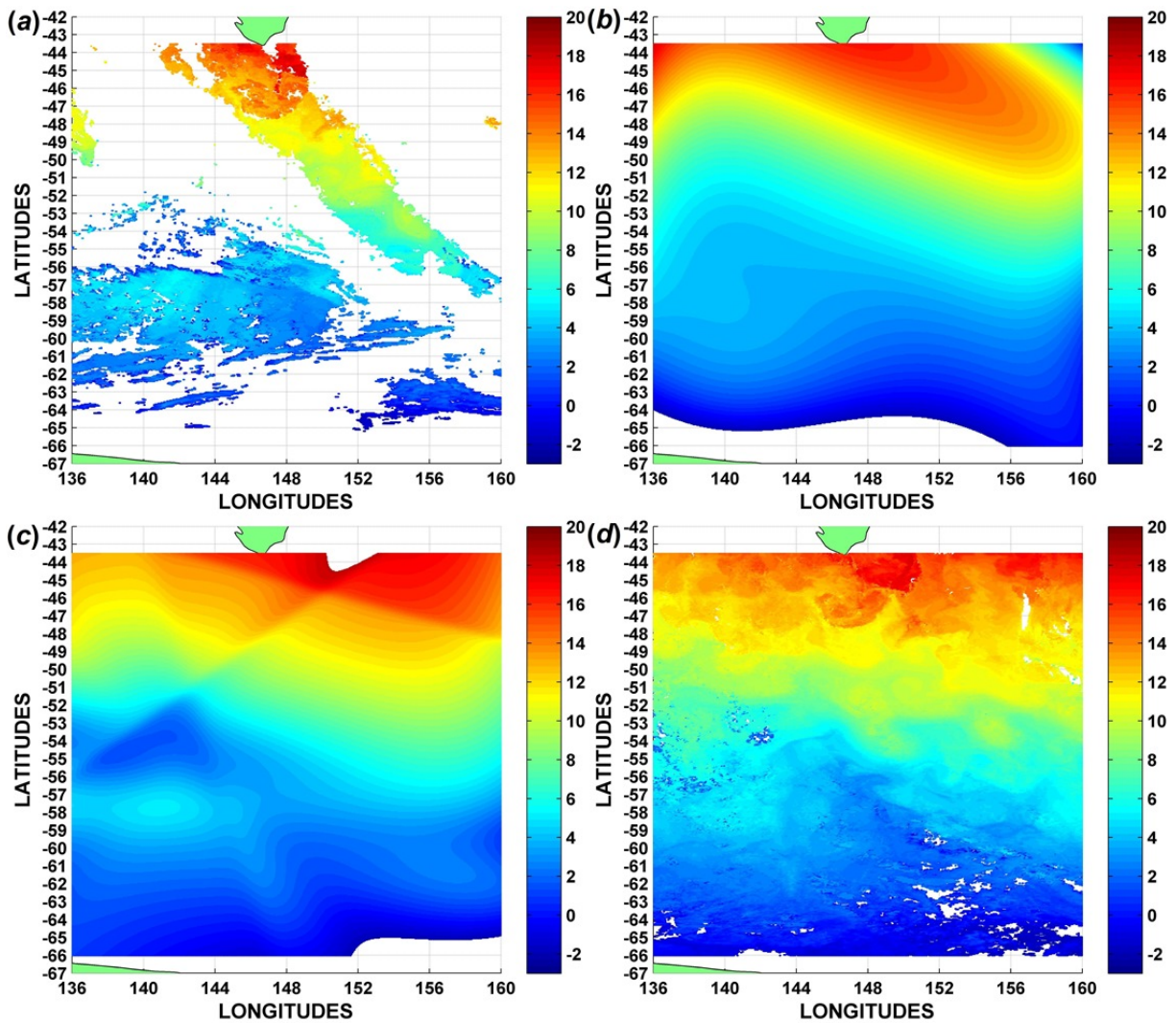


FIGURE 3.7 – Exemple d'image *sat* de température pour les quatre types utilisés dans la généralisation de l'estimation de la salinité, (a) : Image *sat* de température d'une journée, (b) : Interpolation de l'image *sat* en utilisant la Régression Linéaire Multiple, (c) : Interpolation de l'image *sat* en utilisant un Réseau de neurones, (d) : Image *sat* de température sous 8 jours.

Dans ce chapitre, nous avons décrit la procédure adoptée pour estimer la salinité, et cela en utilisant exclusivement des données *sat* qui couvraient toute notre échelle de temps (du printemps à l'été austral de 2002/2003 à 2014/2015). Nous avons ainsi montré pourquoi notre choix s'est porté sur l'utilisation de la température produite par MODIS_{Aqua} pour arriver à notre fin. Dans une première partie, nous avons décrit comment nous avons procédé pour la première rotation R0 (printemps), ainsi que les résultats et les remarques retenues de cette première expérience. Par la suite, dans une deuxième partie, nous avons généralisé notre solution sur toute la période. Ayant reçu des données corrigées de SSS, nous avons refait toutes nos équations puis présenté nos résultats sur l'ensemble des trois rotations.

Une des difficultés rencontrées lors de l'estimation de la salinité était le manque de données *sat* pour la comparaison avec les données *in situ* (lors de l'utilisation des images d'une journée). Nous avons donc procédé à des essais d'interpolation avec la RLM et les FNNs puis nous avons aussi pris des images composites sous 8 jours qui, se sont avérées être la meilleure solution pour notre but en terme d'erreurs obtenues (SST *sat* et SSS estimée).

Ainsi nous concluons ce chapitre en présentant une procédure pour estimer la salinité par des données *sat* de température avec une précision de $\pm 0,16$, et une résolution spatiale de $4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$. À ce jour, ce résultat n'est pas encore atteint par les satellites dans cette région, ainsi, notre solution représente une alternative très intéressante au vu de la disponibilité plus que suffisante de la température *sat*. Le tableau 3.7 présente une nouvelle fois la comparaison entre la SSS estimée en utilisant notre méthode et celle donnée par les deux satellites SMOS (SSS_{SMOS}) et AQUARIUS (SSS_{AQUARIUS}); cette fois-ci, nous comparons avec toutes les rotations une à une et en globalité. Comme pour les résultats présentés dans le tableau 3.4, nous avons fait une intersection des données *sat* de MODIS_{Aqua}, SMOS et AQUARIUS puis estimé les SSS avec les données MODIS_{Aqua}. Ainsi, nous calculons le RMSE de ces trois produits de SSS par rapport à la SSS *in situ*. Cette comparaison montre une nouvelle fois l'apport que peut apporter la modélisation de la SSS en utilisant les données *sat* de SST. On remarque clairement que nos modèles ont respectivement une précision de 0,16 face à SMOS (1,27) et de 0,13 face à AQUARIUS (0,48). En plus de l'article concernant la première approche présentée dans la première section de ce chapitre, la démarche suivie a aussi été utilisée dans un article auquel j'ai participé (Moussa *et al.* (2015); Chapitre A, section A.2.1). La généralisation de la solution quant à elle, a été développée dans mon deuxième article qui est en phase de lecture par les reviewers (Benallal *et al.* (2016b); Chapitre A, section A.1.2)

	SSS _{Model} vs. SSS _{SMOS}		SSS _{Model} vs. SSS _{AQUARIUS}	
	RMSE (SSS _{Model})	RMSE (SSS _{SMOS})	RMSE (SSS _{Model})	RMSE (SSS _{AQUARIUS})
R0	0,17	1,30	0,17	0,55
R2	0,15	1,29	0,10	0,42
R4	0,17	1,25	0,13	0,50
Global R0+R2+R4	0,16	1,27	0,13	0,48

TABLEAU 3.7 – Comparaison de la SSS estimée et la SSS produite par les deux satellites SMOS et AQUARIUS par rapport à la SSS *in situ*.

Chapitre 4

CONTRIBUTION À L'ESTIMATION DE LA FUGACITE DU CO₂

Nous poursuivons dans notre approche qui a pour but d'avoir le maximum de paramètres par satellite afin de calculer le FCO₂. Dans ce chapitre, nous expliquons en détails comment nous avons procédé pour estimer la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ à la surface de l'océan. Si pour la salinité, il est de nos jours possible de l'avoir par satellite¹, il est plus problématique d'avoir la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ par télédétection ; en effet, dans le National Research Council (2000), on explique comment les dernières technologies ne peuvent encore détecter et quantifier certains processus naturels du fait de l'absence de signal électromagnétique. De ce fait, il est plus que nécessaire d'estimer la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ par d'autres paramètres afin de l'interpoler et de la cartographier par satellite.

Plusieurs travaux scientifiques ont étudié les relations que peuvent avoir la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ avec d'autres paramètres océanographiques. La circulation marine affectant la distribution de ces paramètres, on remarque que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dépend principalement de la solubilité du CO₂ et de la biologie marine. La solubilité dépend directement de la SST, la relation SST- $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ a souvent été démontrée dans différentes régions du globe (Gordon et Jones, 1973; Copin-Montegut, 1988; Goyet et Poisson, 1989; Goyet *et al.*, 1993; Lefèvre et Taylor, 2002; Cosca *et al.*, 2003; Chen *et al.*, 2007; Nomura *et al.*, 2014). Cette relation a également été utilisée pour cartographier la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$, comme Stephens *et al.* (1995); Lefèvre et Taylor (2002); Inoue *et al.* (2003); Olsen *et al.* (2004); Lefèvre *et al.* (2005). La biologie marine est également un paramètre qui modifie le carbone inorganique total dans la chimie de l'océan et provoque des variations directes de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (en grande partie par les processus de photosynthèse, respiration et décomposition), on peut citer le travail de Laika *et al.* (2009) qui a étudié l'importance relative de l'activité biologique et de la SST sur les variations de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dans notre région. Il a constaté que la distribution de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ est principalement associée à la SST et la Chla. Cette relation a aussi été utilisée pour cartographier la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dans Chierici *et al.* (2012). Dans d'autres travaux comme Lefèvre *et al.* (2014), la relation entre la SST et la SSS a été étudiée et utilisée pour cartographier la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dans l'ouest de l'océan Atlantique tropical. Dans Moussa *et al.* (2016) (joint dans son intégralité dans le chapitre A, section A.2.2 du fait de ma participation dans ce dernier), c'est la SST, la SSS et la Chla qui ont été utilisées ; une comparaison entre la RLM et les RNs a été réalisée pour

1. Même si nous avons démontré qu'il fallait encore plus de travail sur ce sujet pour avoir une bonne estimation de la SSS par satellite dans l'océan austral.

l'estimation et la cartographie de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$.

4.1 Méthode Adoptée

Dans cette thèse, nous avons choisi de prendre en considération la SST et la Chl_a, nous avons aussi rajouter la SSS afin de voir si cette dernière pouvez augmenter l'efficacité de nos modèles. Pour la modélisation, nous avons, pour chaque rotation, utilisé un RN de type FNN pour estimer la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$. Nous avons donc deux expériences, une avec en entrée du réseau, la SST et la Chl_a et une autre avec en entrée la SST, la Chl_a et la SSS. Pour chacune des deux expériences, nous avons fait varier le nombre de neurones dans la couche cachée entre 1 et 50 neurones, chaque résultat est, par la suite, validé et testé pour déterminer le meilleur réseau pour chaque rotation (voir figure 4.1).

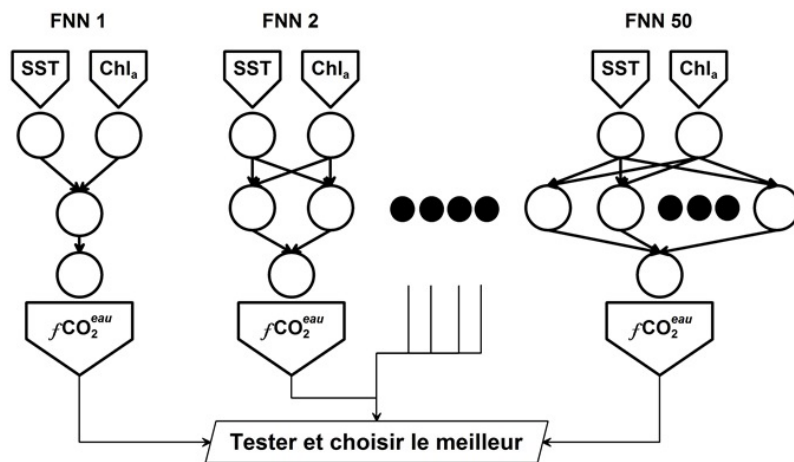


FIGURE 4.1 – Schéma de l'algorithme suivi pour le choix du meilleur FNN pour chaque rotation (exemple pour SST et Chl_a en entrée).

Dans cette section, nous avons utilisé la base d'IMOS (Chapitre 2, section 2.1.1.3), car il n'y a que dans cette base que les données de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ sont disponibles de façon suffisante (plusieurs rotations sur plusieurs années consécutives). Nous avons commencé par diviser notre base en deux parties, cette fois-ci, nous avons partitionné la base de façon uniforme, c'est à dire en prenant les points un par un ; une fois pour la base d'*apprentissage*² et une fois pour la base de *validation* et le *test*³.

4.2 Résultats de l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$

La figure 4.2 présente les résultats de chacune des deux expériences présentées dans la section précédente.

2. Utilisée pour entraîner le réseau de neurones.

3. Comme pour la SSS, nous parlons de base de validation quand celle-ci correspond aux données *in situ* non utilisées pour l'apprentissage et la base de test aux données *sat* (correspondant à la base de validation).

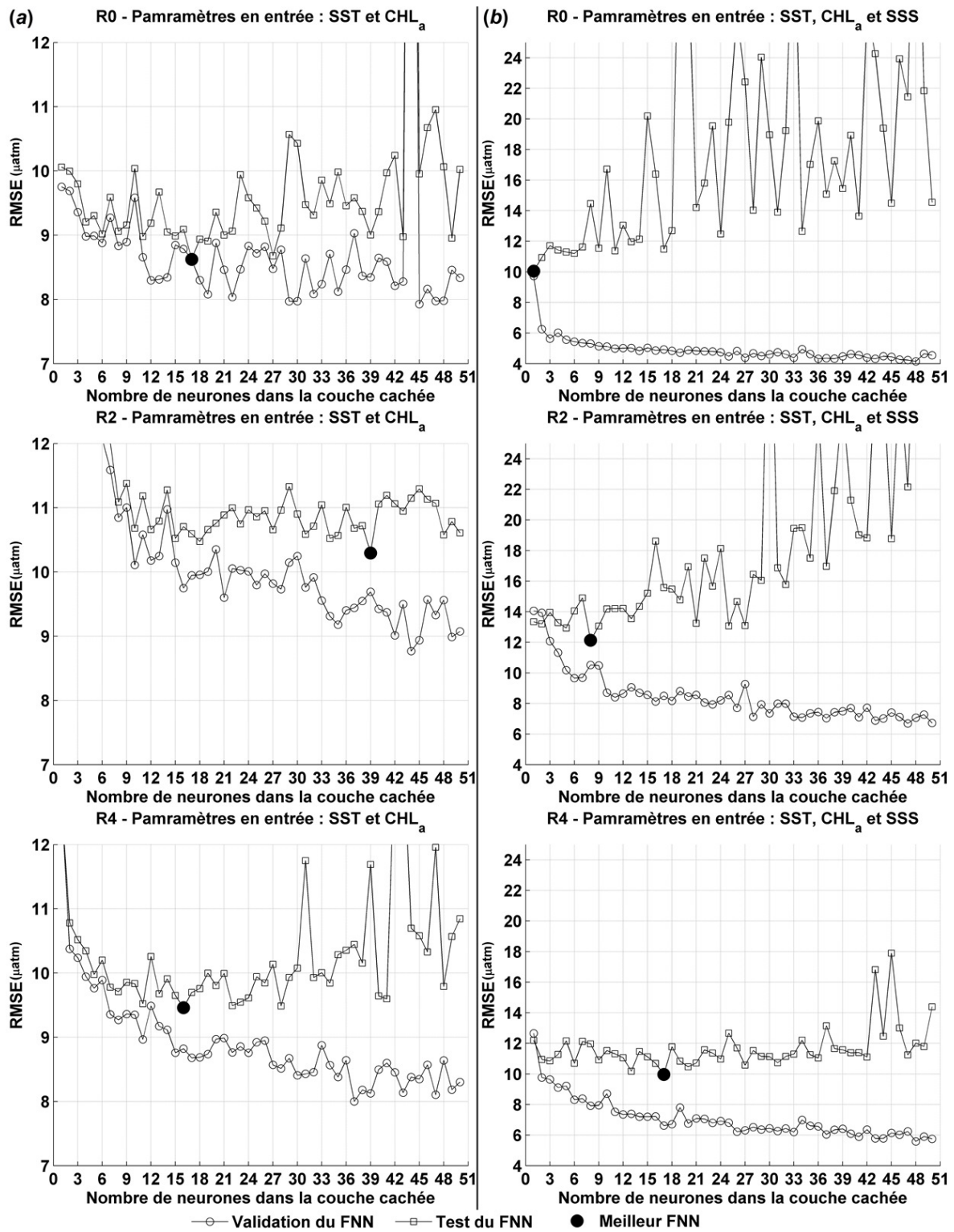


FIGURE 4.2 – Résultats de la validation et du test des FNN pour l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (exprimés en μatm). (a) : SST et Chl_a en entrée du réseau de neurones, (b) : SST, Chl_a et SSS en entrée du réseau de neurones.

En faisant varier le nombre de neurones dans la couche cachée, on remarque que le meilleur FNN n'est pas forcément celui avec le plus grand nombre de neurones cachées ; cependant, le RMSE de la validation a tendance à diminuer avec l'augmentation du nombre de neurones. Ceci s'explique par le fait que plus il y a de neurones dans la couche cachée plus le problème est considéré comme complexe, d'où le fait que le FNN essaye de s'approcher au mieux des données d'apprentissage (*in situ*). Cette aptitude à se rapprocher de plus en plus des données d'apprentissage peut, de façon analogique, s'apparenter à un apprentissage par cœur des données et non plus la représentation d'un modèle généraliste qui intègre l'information liant l'entrée à la sortie. On parle alors de *sur-apprentissage*, c'est ce que l'on essaye d'éviter dans notre approche en gardant un équilibre entre apprentissage et test.

Nous avons donc choisi de comparer en même temps la validation et le test (avec les données *sat*), le meilleur FNN est choisi suivant le plus petit RMSE de la phase de test. Le tableau 4.1 présente les RMSEs des meilleurs FNNs des deux expériences. La première remarque est que l'intégration de la SSS dans le modèle ne fait qu'empirer les résultats en augmentant le RMSE (les valeurs en gras dans le tableau 4.1). l'hypothèse qui nous paraît la plus probable c'est que, comme nous l'avons montré dans le chapitre précédent, il y a une très forte relation entre la SST et la SSS ; nous avons même estimé la SSS en utilisant la SST, ceci montre que l'information que peut apporter la SSS dans le modèle de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ est déjà incluse dans la SST et donc c'est une redondance qui a pu contribuer à augmenter les erreurs lors de l'inclusion de la SSS.

Paramètre en entrée		SST - Chla				SST - Chla- SSS			
Étape		Appr.	Valid.	Test	N.C.C	Appr.	Valid.	Test	N.C.C
R0	MBE	0,0652	0,0266	-0,3564		-0,0446	-0,0770	0,0187	
	MAE	6,0367	6,0179	6,2171	17	7,1619	7,1260	7,3886	1
	RMSE	8,6227	8,6065	8,6234		9,7221	9,7001	10,0443	
R2	MBE	0,0922	0,0997	-0,2705		-0,1156	-0,1220	-1,9274	
	MAE	7,3753	7,3726	7,9191	39	8,0089	7,9949	9,5768	8
	RMSE	9,6891	9,6701	10,2950		10,5188	10,4980	12,1289	
R4	MBE	-0,0087	-0,0013	-0,3553		-0,0302	-0,0180	-1,9886	
	MAE	6,6645	6,6641	7,0887	16	4,8620	4,8714	7,3428	17
	RMSE	8,8220	8,8182	9,4595		6,6190	6,6174	9,9655	
Glob.	MBE	0,0389	0,0330	0,3337	-	-0,0565	-0,0621	,13867	-
	MAE	6,6648	6,6586	7,0489	-	6,3469	6,3371	7,9337	-
	RMSE	8,9977	8,9864	9,4517	-	8,7116	8,6975	10,5891	-

TABLEAU 4.1 – Récapitulatif des résultats pour les meilleurs réseaux de neurones lors de l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$. Appr. : Apprentissage, Valid. : Validation, N.C.C. : Nombre de neurones dans la Couche Cachée

Ces résultats montrent une bonne estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ en utilisant la SST et la Chla, avec des RMSE global de $9.45 \mu\text{atm}$ ($8,62, 10,30, 9,46 \mu\text{atm}$ pour R0, R2 et R4 respectivement), le nombre de neurones optimal résultant de cette expérience est de 17, 39 et 16 neurones pour

R0, R2 et R4 respectivement. La figure 4.3 présente pour chaque rotation la régression correspondante au meilleur FNN entre la $f\text{CO}_2^{\text{eau}} in situ$ et celle estimée avec les données *sat*; les coefficients de corrélation (R) obtenus sont de 0,73, 0,73 et 0,74 respectivement pour R0, R2 et R4; ceci montre encore une fois la performance des modèles obtenus grâce à l'utilisation des FNNs.

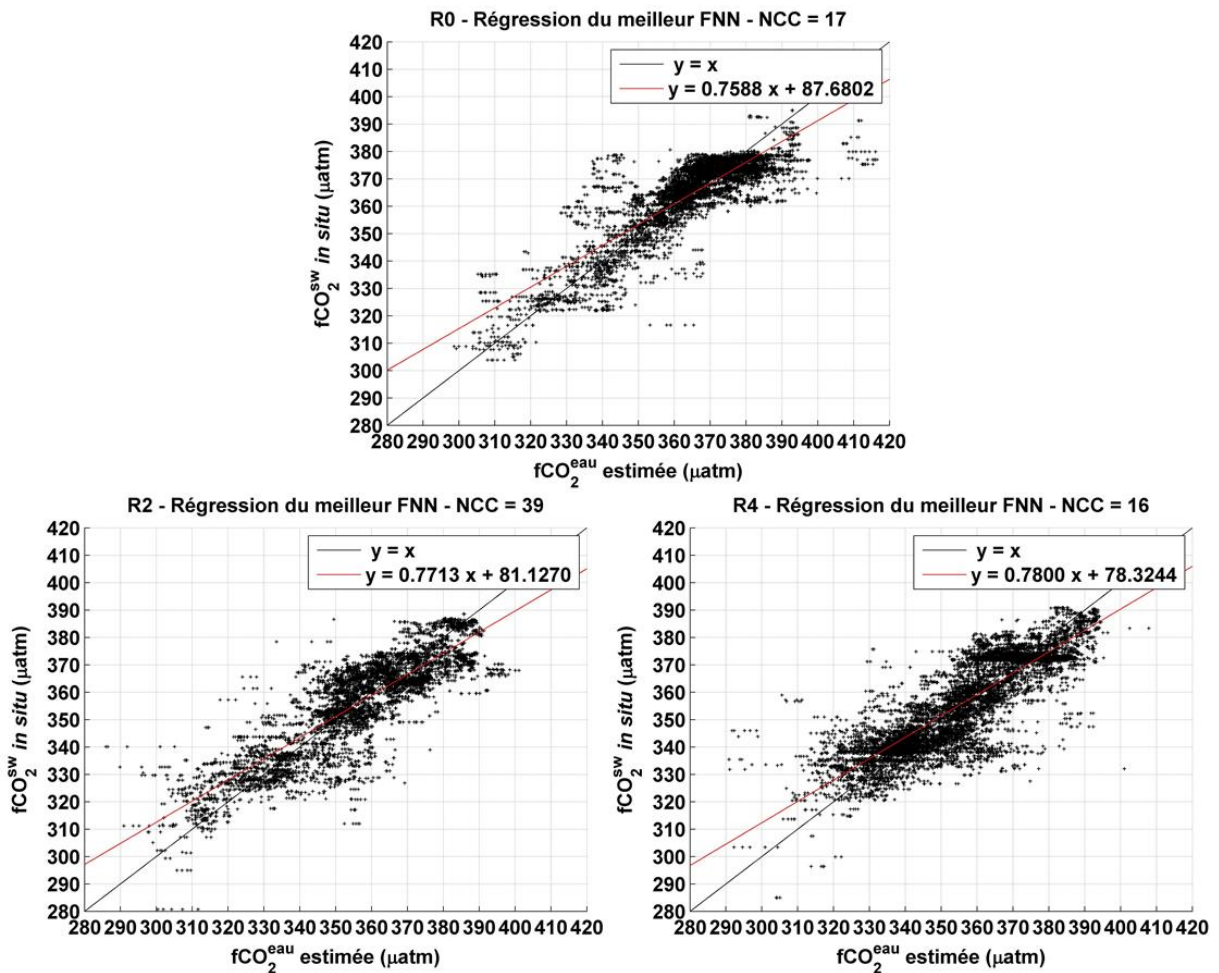


FIGURE 4.3 – Régression de l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ pour les meilleurs réseaux de neurones des trois rotations, NCC : nombre de neurones dans la Couche Cachée.

Cette démarche a été inspirée puis développée dans l'océan atlantique tropical dans l'article publié et présenté dans le Chapitre A, section A.2.2 et auquel j'ai vivement participé. Par la suite j'ai suivi cette méthode pour l'appliquer sur ma région de l'océan austral; les résultats obtenus sont eux présents dans un deuxième article qui est actuellement en lecture par les reviewers (dans son intégralité dans le Chapitre A, section A.1.2).

Comme présenté en chapitre 2 section 2.1.1.1, j'ai pu avoir accès à une nouvelle base de

données (disponible en avril 2016) que nous avons appelé MINERVE_2 et qui contient quelques données de $f\text{CO}_2^{eau}$ pour certaines rotations (et différente de la base d'IMOS en terme de couverture temporelle). Nous rajoutons donc ce paragraphe afin de montrer les résultats obtenus en utilisant cette base (Tableau 4.2). Étant donné le nombre très faible de rotations et d'années couvertes, nous ne pouvons que considérer ces résultats comme acceptables (RMSE de $\sim 13,56 \mu\text{atm}$). Le traitement des données MINERVE de $f\text{CO}_2^{eau}$ dans le futur permettrons bien évidemment d'étoffer la base de données et même contribuer au calibrage des modèles construits.

Rotation	R0	R2	R4	Global
RMSE (μatm)	13.63	13.43	13.82	13.56

TABLEAU 4.2 – Résultats de la validation *in situ* des modèles de $f\text{CO}_2^{eau}$ en utilisant la base de données MINERVE_2.

4.3 Cartographie de la $f\text{CO}_2^{eau}$

La figure 4.4 présente un exemple du résultat obtenue pour la cartographie de la $f\text{CO}_2^{eau}$ dans différentes périodes du printemps à l'été austral de 2012/2013. Nos modèles ainsi obtenus nous ont permis d'avoir la $f\text{CO}_2^{eau}$ durant toute la saison de l'été austral de 2002/2003 à 2014/2015.

Grâce aux résultats et au modèle (les FFNs) obtenus, nous pouvons dès à présent estimer et cartographier la $f\text{CO}_2^{eau}$ dans notre région d'étude, nous avons donc fait cela pour toute notre échelle de temps ; c'est à dire d'octobre à mars de 2002/2003 à 2014/2015. Les cartes ainsi obtenues peuvent nous permettre d'étudier la variabilité de la $f\text{CO}_2^{eau}$ avec une vision plus globale de la distribution interannuelle de ce paramètre.

La figure 4.4 nous donne un exemple du comportement de la $f\text{CO}_2^{eau}$ au fil de la période étudié ; ainsi on remarque que plus en avance dans le temps (du printemps vers l'été austral), plus l'on remarque que la $f\text{CO}_2^{eau}$ diminue dans les côtes antarctiques et australiennes (tout au nord et tout au sud). Ceci est dû aux phénomènes biologiques agissant dans ces zones (présentées en Chapitre 1, section 1.2.4).

En annexe F.2, nous présentons toutes les cartes de $f\text{CO}_2^{eau}$ que nous avons produites en utilisons nos FNNs.

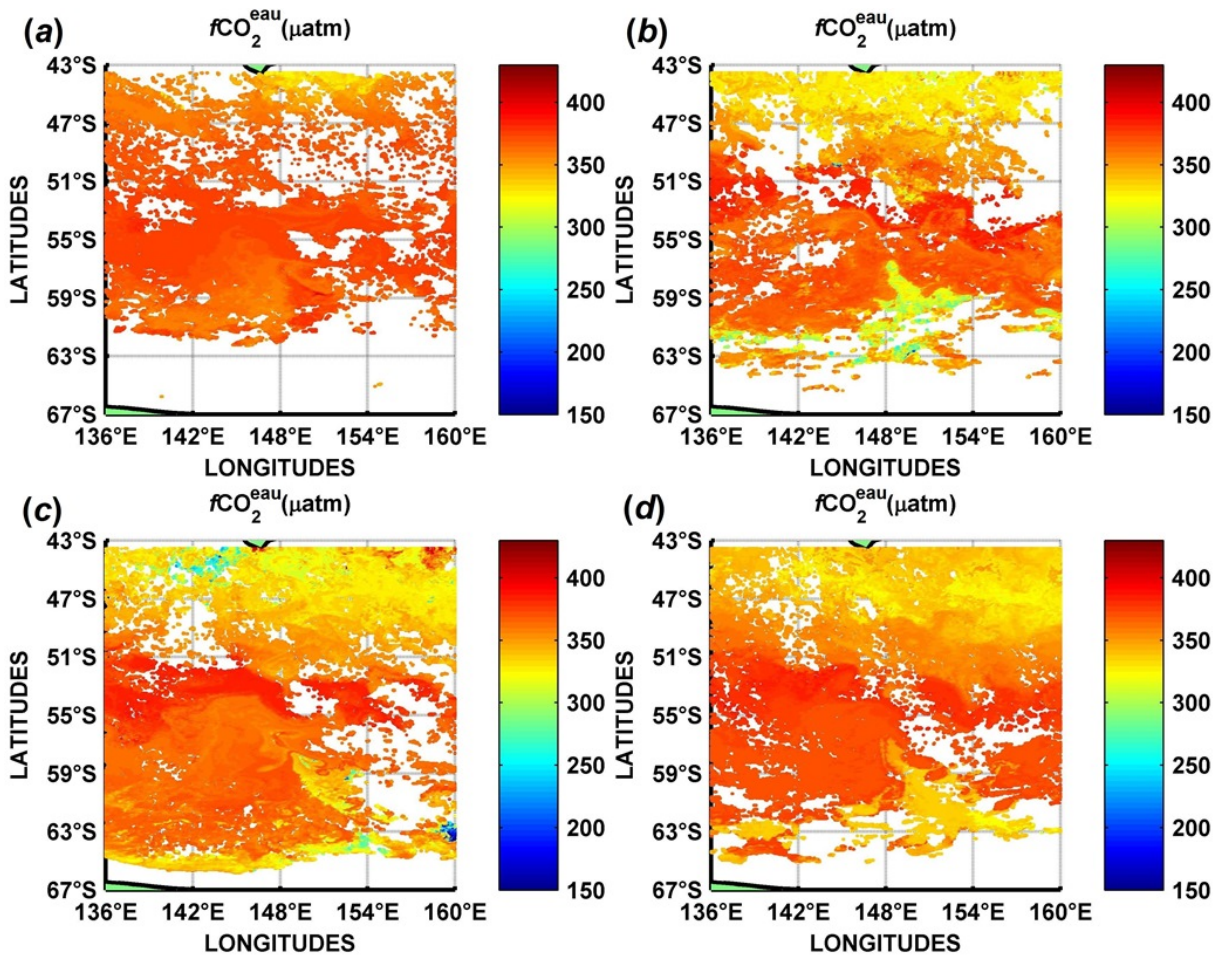


FIGURE 4.4 – Exemples d'estimation et de la distribution de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ à différentes périodes de l'été austral 2012/2013. (a) : du 23/10/2012 au 30/10/2012, (b) : du 18/12/2012 au 25/12/2012, (c) : du 30/01/2013 au 09/02/2013, (d) : du 11/03/2013 au 21/03/2013.

La figure 4.5 présente la distribution obtenue pour la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ durant la saison ainsi que la variabilité interannuelle. On remarque en (a) que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ est stable au début de la saison et chute d'environ $20 \mu\text{atm}$ en mi-décembre (l'activité biologique contribuant à la consommation du carbone) pour repartir graduellement à la hausse jusqu'en fin de saison (toutes les latitudes sont prises en considération). Si l'on regarde la partie (b), On remarque que la moyenne générale est de $\sim 357 \mu\text{atm}$, mais si l'on sépare notre région en deux parties distinctes (la région sub-antarctique SAR et la région antarctique AR vues en chapitre 1, figure 1.4), on remarque que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ est plus élevée au sud du front polaire (une moyenne de $\sim 362 \mu\text{atm}$) qu'au nord (une moyenne de $\sim 354 \mu\text{atm}$).

En ce qui concerne la variabilité interannuelle, si l'on prend que la partie entre 2008/2009 et 2012/2013, on remarque comme pour les données *in situ*, que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ augmente. Ceci dit, si l'on regarde sur toute notre échelle de temps (treize ans), on remarque que la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ prend des tendances différentes au fil des années ; cela autour des moyennes citées précédemment ; avec des

périodes d'augmentation suivi de baisse (avec des variations plus fortes pour l'AR). Nous pouvons en déduire qu'à la surface de l'océan, l'augmentation du niveau de la fCO_2^{eau} est suivie par une étape de diminution grâce aux phénomènes physiques et biologiques décrits précédemment. Nous verrons par la suite dans l'analyse des résultats du flux de CO₂ ce que cela implique sur l'échange du CO₂ à l'interface air-mer.

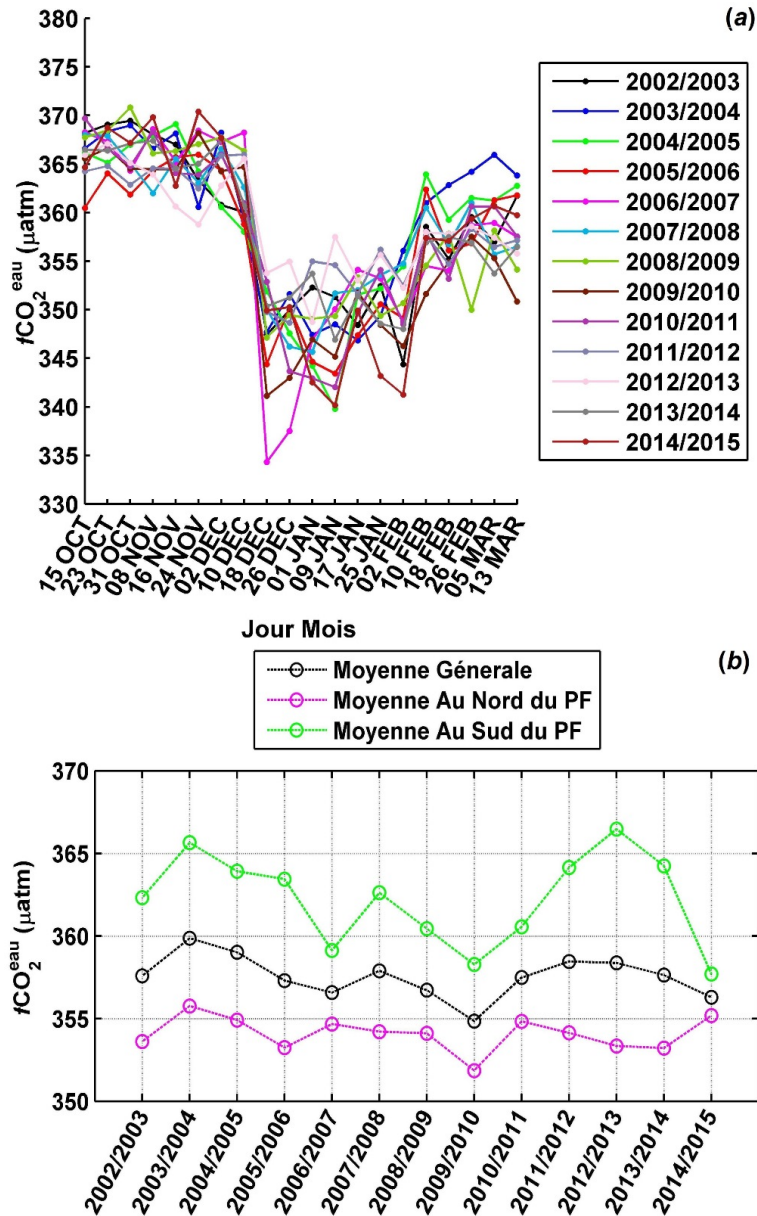


FIGURE 4.5 – Distribution de la fCO_2^{eau} entre 2002 et 2013 dans l'été austral (en utilisant la fCO_2^{eau} estimée par les FNN). (a) : Évolution de la fCO_2^{eau} durant la saison, (b) : Évolution inter-annuelle de la fCO_2^{eau} , PF : Front polaire ($\sim 54,5^\circ S$).

Dans ce chapitre, Nous avons présenté l'approche proposée pour l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$, nous avons décrit la méthode adoptée, basée sur les FNNs en utilisant la SST et la Chla.

Les résultats de la modélisation obtenus montrent une très bonne estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ avec un RMSE de 9,45 μatm . Ceci nous a donné la possibilité de cartographier la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ sur notre région d'étude, puis d'analyser ainsi la distribution inter-annuelle de ce paramètre sur la période qui s'étend du printemps à l'été austral.

Les cartes produites de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ nous ont permis de conclure que la surface de l'océan, était marqué par des périodes de hausse puis d'autres de baisse de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$. Cette tendance générale a été remarquée au sud comme au nord du PF. Dans le chapitre suivant, nous calculerons le flux de CO₂ et montrerons l'influence du $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ sur ce flux.

Chapitre 5

CONTRIBUTION A L'ESTIMATION DU FLUX DE CO₂

Dans ce chapitre, nous estimons le flux de CO₂ (FCO₂) dans le secteur australien de l'océan austral. Cette dernière étape tient compte des travaux présentés dans les chapitres précédents. Ainsi grâce aux paramètres estimés par satellite, nous pouvons dès à présent calculer le flux et le cartographier pendant la période étudiée.

5.1 Méthode adoptée pour le calcul du FCO₂

Nous avons présenté dans le chapitre 1, section 1.3 le calcul du FCO₂ ainsi que les paramètres nécessaires dans ce calcul. Comme notre but est d'estimer ce flux en utilisant les données *sat*, les titres et chapitres qui ont suivi ce premier chapitre ont porté sur la modélisation des paramètres océanographiques indisponibles (ou insuffisants) par *sat*. Dans une première partie de cette thèse (Chapitre 3), nous avons montré comment nous avons procédé pour avoir la SSS par *sat*. Dans le chapitre 4, nous avons aussi décrit la procédure suivie pour l'estimation de la fCO_2^{eau} par *sat*, et nous avons ainsi utiliser ces estimations pour interpoler nos résultats et cartographier la SSS puis la fCO_2^{eau} de 2002/2003 à 2012/2015.

Dans cette section, nous entamons ainsi cette étude en présentant le calcul du FCO₂. Nous allons donc suivre l'algorithme présenté dans la figure 5.1 ; ce dernier regroupe l'approche globale de la thèse. Comme on le voit, nous allons calculer le FCO₂ en utilisant les données *in situ*, puis faire ce même calcul en utilisant les données *sat* (produites par les satellites et celles estimées par nos modèles). Il est à noter que même si nous n'avons pas utilisé de données *sat* de la fCO_2^{air} , nous avons pris la fCO_2^{air} d'IMOS pour la partie *in situ* et la fCO_2^{air} de Cape Grim pour la partie *sat*, ainsi nous gardons une distinction entre les deux calculs (la station Cape Grim offrant une valeur de fCO_2^{air} en continu et sans interruption comme pour les données *sat*).

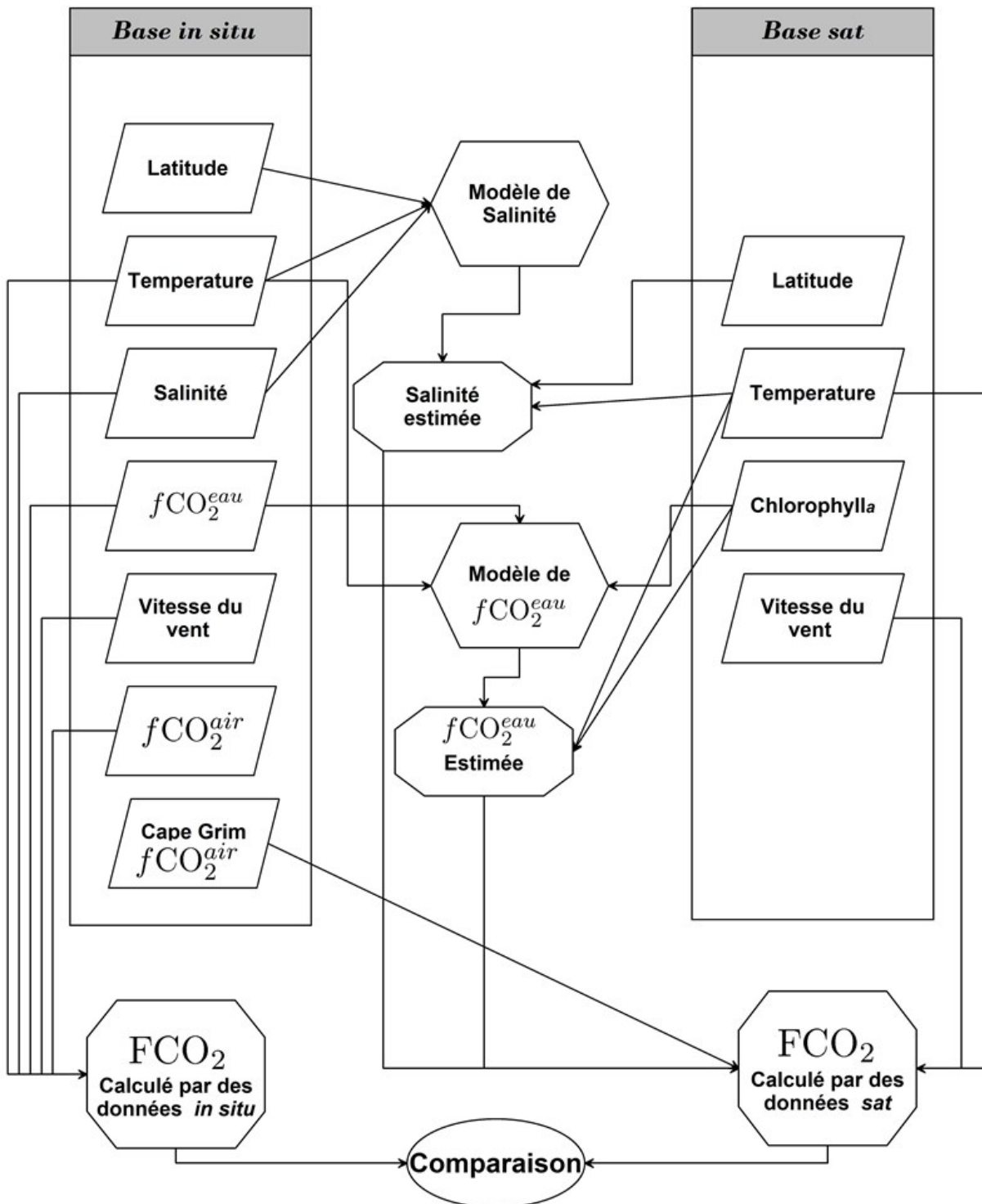


FIGURE 5.1 – Algorithme général adopté pour le calcul du FCO₂ en utilisant les données *in situ* et *sat* (brutes ou modélisées).

Tout les paramètres nécessaires aux calculs ainsi obtenus ou estimés, nous pouvons maintenant procéder au calcul, pour ce faire ; nous proposons le code source 5.1 qui représente une fonction qui :

— Prend en entrées :

1. La température à la surface de l'océan (en °C).
2. La salinité à la surface de l'océan (Sans unité).
3. La vitesse du vent (en m.s⁻¹ et à environ 10 m de hauteur).
4. La $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (en μatm).
5. La $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ (en μatm).
6. La référence d'équation voulue pour le calcul (de 1 à 11 suivant le tableau des référence pour le calcul du paramètre k (Tableau 1.1, Chapitre 1)).

— Donne en sortie :

1. La valeur du Coefficient de transfert k (en cm.h⁻¹).
2. Le FCO₂ à l'interface air-mer (en mmol CO₂.m⁻².j⁻¹).
3. Le $\Delta f\text{CO}_2$ ($f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ - $f\text{CO}_2^{\text{air}}$ en μatm).

Il est à noter que cette fonction est inspirée de celle proposée par Cecilia Chapa Balcorta de l'*Universidad Autónoma De Baja California* publiée en ligne en Avril 2014 et mise à jour en Mars 2015 (<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/50190-air-sea-co2-flux/content/FCO2.m>), et sur laquelle nous avons rajouté les équations récentes ainsi que quelques modifications mineurs pour l'adapter à nos besoins en programmation.

```

function [K,F_CO2, dpCO2]=FCO2(fCO2_aqua, fCO2_atm,T,S,u,Ref)
Sc=Schmidt(T); % Calcul du nombre de de Schmidt (Sc)
switch Ref % Calcul du coefficient de transfert K
  case 1 % Liss and Merlivat (1986)
    K=zeros(size(u,1),1);
    id=u<=3.6; K(id) = (0.170.*u(id)) .* ((Sc(id)./600).^(-2/3)) ;
    id=u>13; K(id) = ( 5.9.*u(id)-49.3 ) .* ( (Sc(id)./600).^(-0.5) );
    id= (u>3.6 & u<=13); K(id) = ( 2.85.*u(id)-9.65 ) .* ( (Sc(id)./600).^(-0.5) );
  case 2 % Wanninkhof (1992)
    K=zeros(size(u,1),1);
    id=u<=6; K(id)=0.31*(u(id).^2).*((Sc(id)./660).^(-0.5));
    id=u>6; K(id)=0.39*(u(id).^2).*((Sc(id)./660).^(-0.5));
  case 3 % Wanninkhof and McGillis (1999)
    K = 0.0283*u.^3.*( (Sc./660).^(-0.5) );
  case 4 % Nightingale et al. (2000)
    K = ( 0.222*u.^2+0.333*u ).*( (Sc./600).^(-0.5) );
  case 5 % Jean-Baptiste et Poisson (2002)
    K = 1.45 * u.^1.5 .* ( (Sc./310).^(-0.5) );
  case 6 % Ho et al. (2006)
    K = 0.266 * u.^2 .* ( (Sc./600).^(-0.5) );
  case 7 % Sweeney et al. (2007)
    K = ( 0.27*u.^2 ).*( (Sc./660).^(-0.5) );
  case 8 % Wanninkhof et al. (2009)
    K = 3+ 0.1*u + 0.064*u.^2 + 0.011*u.^3 .* ( (Sc./660).^(-0.5) );
  case 9 % Ho et al. (2011) a
    K = 0.286*u.^2 .* ( (Sc./600).^(-0.5) );
  case 10 % Ho et al. (2011) b
    K = 0.0298*u.^3 .* ( (Sc./600).^(-0.5) );
  case 11 % Wanninkhof (2014)
    K = 0.251*u.^2 .* ( (Sc./660).^(-0.5) );
  otherwise disp('Réf rence Inconnue');
end
dpCO2=fCO2_aqua-fCO2_atm; % Calcul du Delta fCO2
a=Ko_weiss(T,S); %Coefficient de Solubilit  en mmol L^-1 atm^-1 or mmol m^-3 uatm^-1
F_CO2 = 0.24*K.*a.*dpCO2; % flux de CO2 (mmol m^-2 d^-1)
end
% Coefficient de solubilit  (Weiss, 1974)
function [Ko]=Ko_weiss(T,S)
A=[-60.2409, 93.4517, 23.3585]; B=[0.023517, -0.023656, 0.0047036]; % mol/Kg.atm
T=T+273.15; % Conversion en Kelvins
Ln_Ko=A(1)+(A(2).*(100./T))+(A(3).*log(T./100))+...
S.*(B(1)+(B(2).*(T./100))+(B(3).*(T./100).^2));
Ko=exp(Ln_Ko);
end
% Nombre de Schmidt (Sc)
function [Sc]=Schmidt(T)
A = 2073.1; B = 125.62; C = 3.6276; D = 0.043219; Sc= A - (B.*T)+(C.*T.^2)-(D.*T.^3);
end

```

5.2 Vitesse du vent et coefficient de transfert

Comme nous l'avons vu lors de la présentation de l'échange air-mer de CO₂ (Chapitre 1, section 1.3), calculer le FCO₂ revient à faire un choix sur quelle équation utiliser pour avoir le coefficient de transfert k . Ce dernier, très fortement lié à la vitesse du vent, peut prendre des valeurs différentes suivant l'équation choisie. Dans la figure 5.2, on peut visualiser la variabilité de k par rapport à la vitesse du vent. On remarque que plus la vitesse du vent augmente, plus il y a de différence entre les équations. Nous devons tout de même rappeler que chaque référence pour ces équations a été réalisée dans différentes régions du globe et dans différentes conditions, il n'y a donc pas de meilleur equation mais on peut baser nos choix suivant les travaux scientifiques précédemment réalisés. Ainsi, si l'on se réfère à la littérature, on se rend compte que l'équation de Wanninkhof (1992) est l'une des plus utilisées¹ et que cette dernière a été récemment mise à jour dans Wanninkhof (2014), il nous est donc très approprié de faire les calcul avec cette dernière pour comparer nos résultats. Nous pouvons aussi nous rendre compte que l'équation de Ho *et al.* (2006) est très proche de cette dernière ; ceci nous conforte dans notre choix car cette équation a été développée dans l'océan austral à quelques centaines de km de la côte sud Néo-Zélandaise (très proche de notre région). Cependant, nous présenterons à chaque étape tout les résultats avec toutes les autres équations en annexe G.

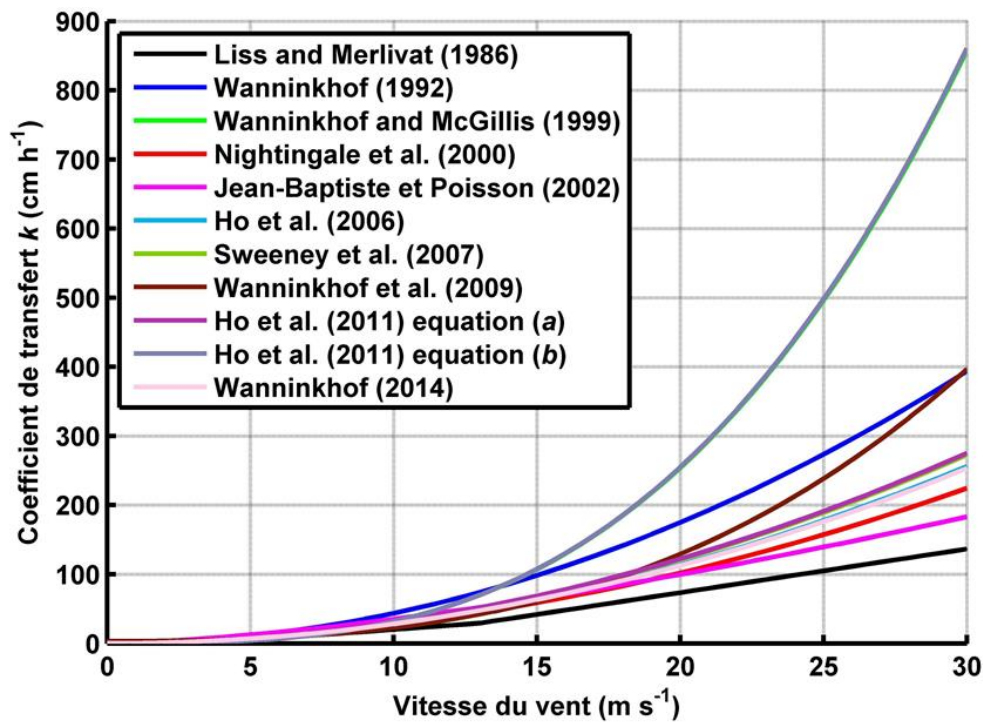


FIGURE 5.2 – Variabilité du coefficient de transfert k par rapport à la vitesse du vent.

1. L'équation de (Wanninkhof, 1992) a, par exemple, été utilisée dans (Metzl *et al.*, 1995, 1999; Le Quéré *et al.*, 2000; Louanchi et Hoppema, 2000; Takahashi *et al.*, 2002; Olsen *et al.*, 2004; McNeil *et al.*, 2007; Boutin *et al.*, 2008; Thomas *et al.*, 2008; Matear et Lenton, 2008; Rödenbeck *et al.*, 2013)

La figure 5.3 présente la distribution des valeurs de vitesse du vent *in situ* données par IMOS. On remarque que la majorité des valeurs se situent entre 5 m.s⁻¹ et 15 m.s⁻¹ avec tout de même des valeurs qui dépassent les 30 m.s⁻¹.

5.3 Calcul du FCO₂

Rappelons que nous avons pour chaque rotation R0, R2 et R4 un modèle de SSS (basé sur la RLM ; en utilisant la *lat* et la SST) et un autre pour la fCO_2^{eau} (basé sur les FNNs ; en utilisant la SST et la Chla). Ainsi nous allons appliquer l'algorithme présenté dans la figure 5.1 et montrer les résultats obtenus. Le tableau 5.1 présente les résultats obtenus lors du calcul du FCO₂ avec les données *in situ* et *sat* suivant l'équation de Wanninkhof (2014) (Les mêmes calculs ont été faits pour les autres équations et sont présentés en annexe G.1).

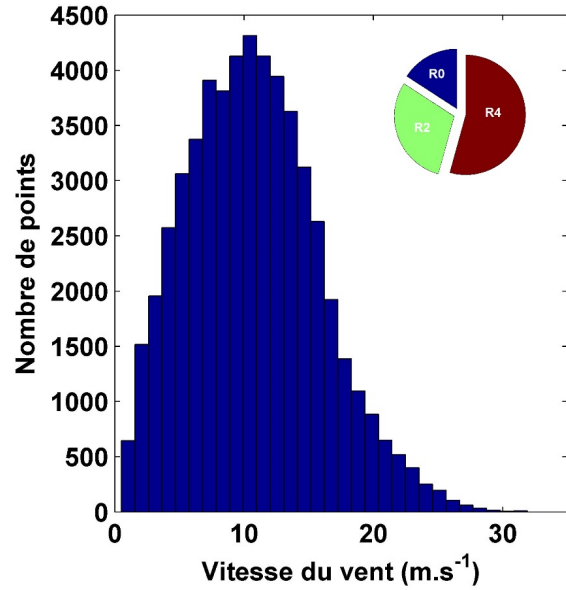


FIGURE 5.3 – Histogramme de la vitesse du vent *in situ* issue de la base de données IMOS.

Nous avons obtenu un RMSE d'environ 3 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹ avec un *R* de 0,81 soit une corrélation significative entre les deux calculs du Flux. La figure 5.4 présente cette régression, toutes les autres régressions des autres équations sont présentées en annexe G.2.

R0		R2		R4		Glob.	Glob.
RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>
3,36	0,72	3,27	0,86	2,73	0,84	3,07	0,81

TABLEAU 5.1 – Résultats du calcul du flux en utilisant l'équation de Wanninkhof (2014) : le RMSE (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) est calculé suivant la différence entre le calcul du FCO₂ avec les données *in situ* et *sat*, le *R* est le coefficient de corrélation de la régression entre le FCO₂ calculé avec les données *in situ* et *sat*, Glob. : Global.

Cette corrélation entre les deux calculs (*in situ* et *sat*) montre encore une fois que l'utilisation des modèles développés offrent une alternative très intéressante pour l'estimation du FCO₂ via des données *sat* et donc la cartographie de ce flux. Un exemple de cartographie du FCO₂ est présenté dans la figure 5.5 et toutes les cartes produites par nos modèles sont présentées en annexe G.3.

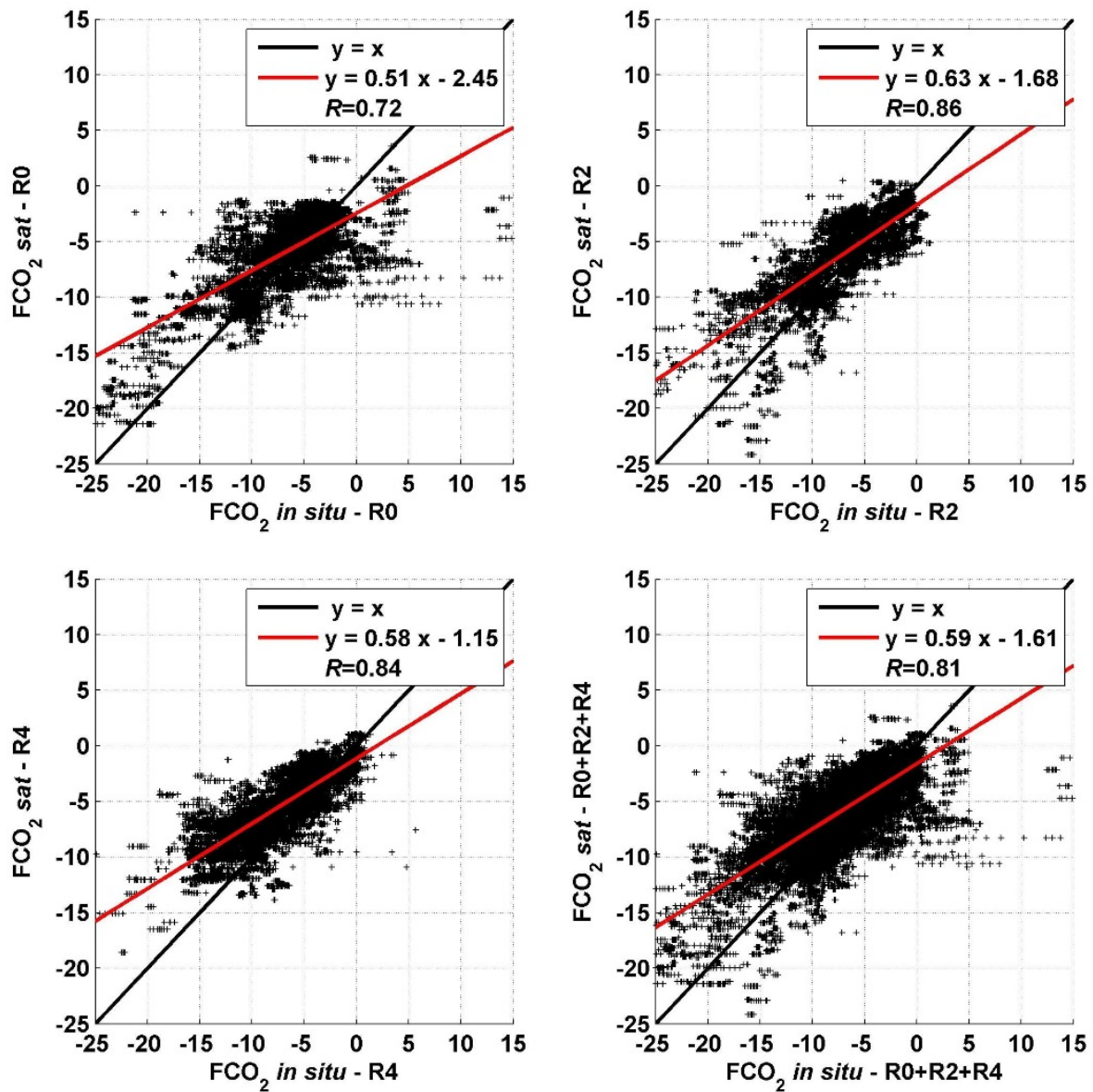


FIGURE 5.4 – Régression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat* exprimées en mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) pour l'équation de Wanninkhof (2014).

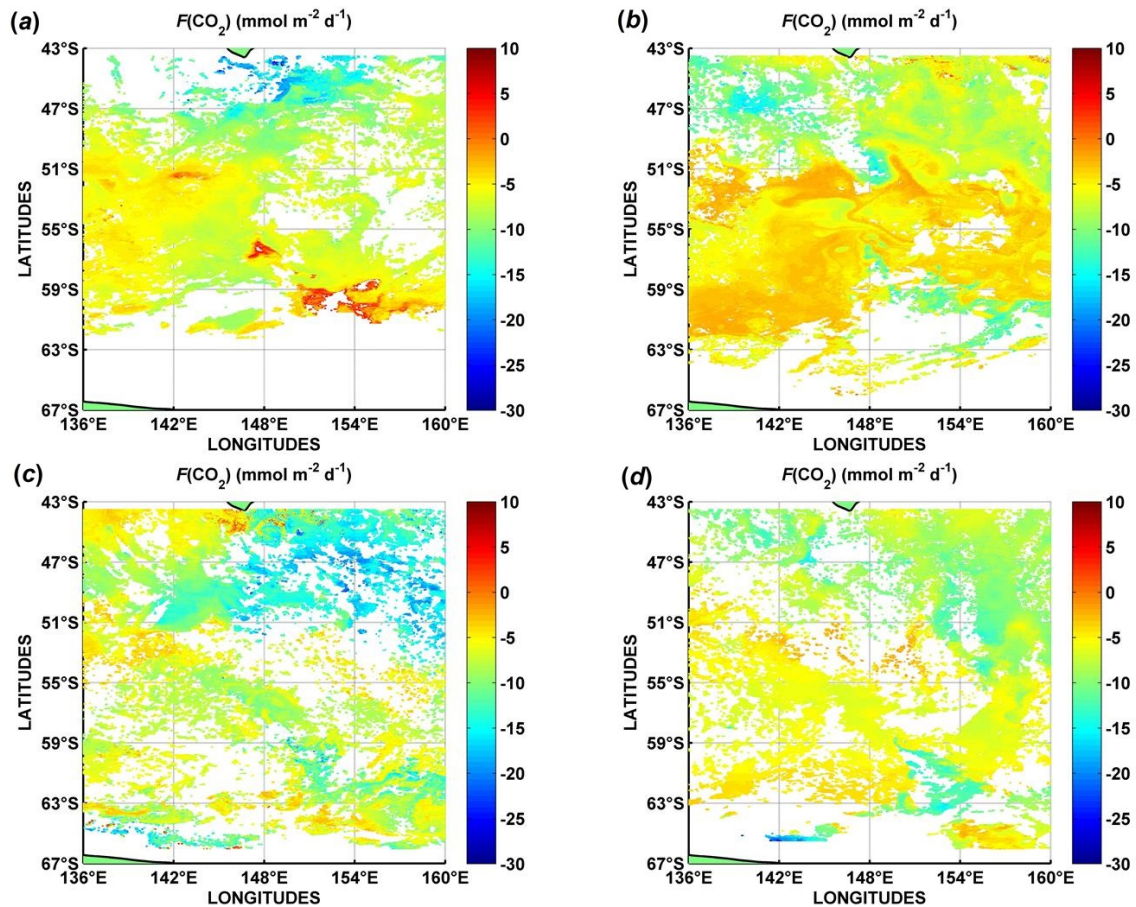


FIGURE 5.5 – Exemples d'estimation et de cartographie de la FCO₂ à différentes périodes de l'été austral 2014/2015. (a) : du 23/10/2014 au 30/10/2014, (b) : du 18/12/2014 au 25/12/2014, (c) : du 30/01/2015 au 09/02/2015, (d) : du 11/03/2015 au 21/03/2015.

5.4 Analyse des résultats et discussion

Les cartes ainsi développées, nous pouvons dès à présent analyser la variation du FCO₂. Nous avons une échelle de temps qui s'étend de 2002/2003 à 2014/2015 et une couverture spatiale de l'océan austral (AR et SAR) du secteur australien.

La figure 5.6 présente la distribution inter-annuelle du FCO₂ obtenue ainsi que les anomalies d'une année à une autre (différence entre une années et celle qui la précède), toutes les autres figures du même type sont présentés en annexe G.4. Toutes les distributions présentées dans cette annexes montrent la différence induite par l'utilisation de telle ou telle équation ; ce que l'on remarque, c'est que les résultats obtenus par l'équation que nous avons choisi se trouve être une moyenne entre les autres. Ainsi, nous pouvons estimer que ce choix s'avère être un bon compromis entre toutes les équations. Rappelons que ces équations sont toujours en perpétuel développement ; dernièrement, dans Woolf *et al.* (2016), une étude sur les échange de CO₂ à montrer que des erreurs sur l'estimation du flux ont été constatées a cause des changements de

température de la fine couche au contact de l'air. Ceci montre encore une fois que les résultats présentés sont des estimations ; dans cette thèse, nous ne remettons pas en question la validité des équations du calcul du FCO₂, celles-ci étant toujours en mise à jour au fil des années et des régions étudiées.

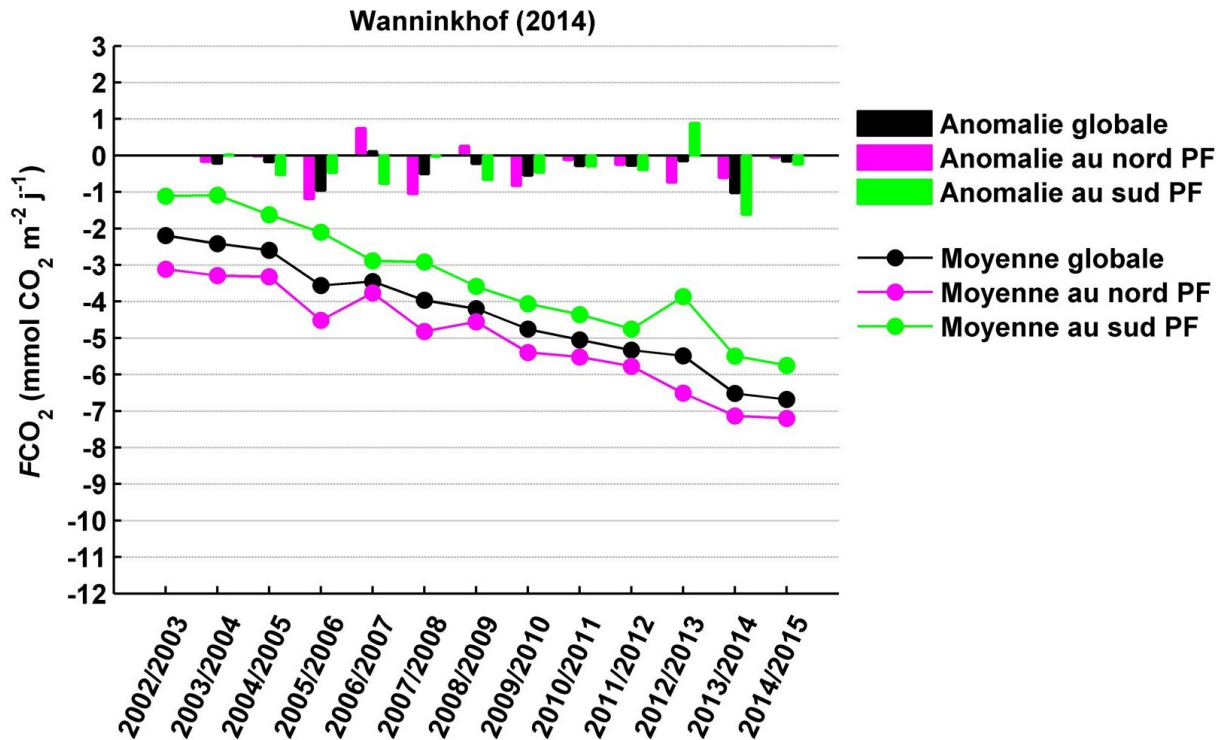


FIGURE 5.6 – Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO₂ suivant l'équation de Wanninkhof (2014).

La distribution obtenue de l'absorption du CO₂ dans la région montre une augmentation de ce taux d'absorption, ceci est directement lié à l'augmentation de fCO_2^{air} . La couche de surface réagit donc à cette augmentation en absorbant de plus en plus le CO₂ dans l'air, on remarque alors une moyenne qui part de ~ -2 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹ en 2002/2003 à ~ -7 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹ en 2014/2015 pour la période entre Octobre et Mars, cette baisse touche aussi bien la partie au nord et au sud du PF avec une absorption plus forte pour la SAR au nord du PF ; ceci est dû au fait que la fCO_2^{eau} est plus élevé dans l'AR. Cette surcharge de CO₂ par rapport à la SAR fait que l'océan absorbe moins de CO₂. Si l'on observe les anomalies d'une année à une autre, nous avons une augmentation moyenne de l'absorption de l'ordre de -0.37 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹. Si l'on reprend maintenant tout les paramètres utilisés pour le calcul du flux de CO₂ (Figure 5.7), la première remarque que l'on peut voir c'est la relation directe avec l'augmentation de la fCO_2^{air} au fil des années. La deuxième remarque est que le FCO₂ réagit avec l'augmentation ou la baisse de la fCO_2^{eau} vis à vis de son taux d'absorption (l'augmentation d'une années à une autre du fCO_2^{eau} induit une baisse (ou stabilisation) dans le taux l'absorption et vis versa ; une eau plus chargée en CO₂ a une capacité d'absorption moindre).

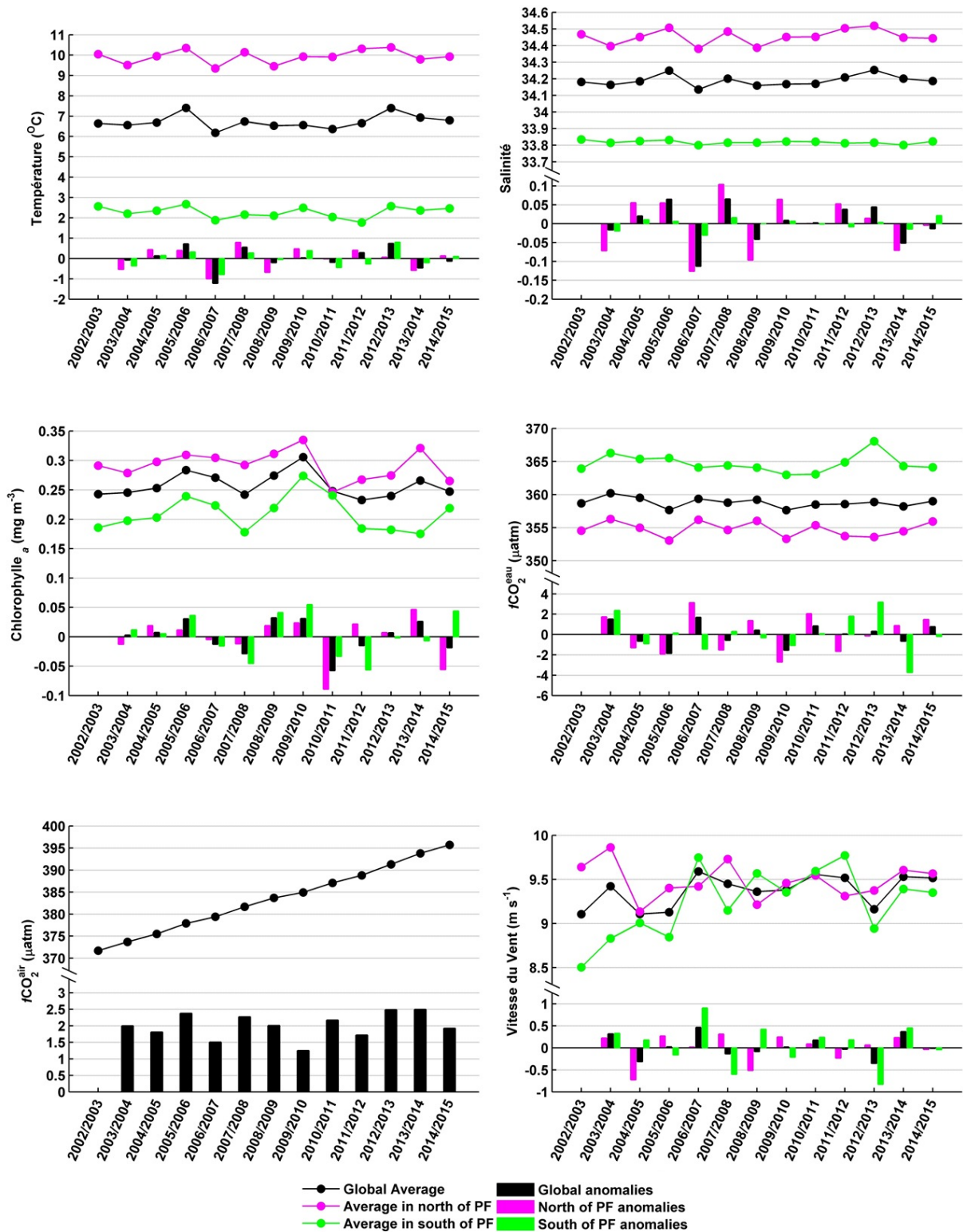


FIGURE 5.7 – Variabilité inter-annuelle et anomalies des paramètres utilisés pour le calcul du FCO₂.

Comme nous l'avons vu lors de notre analyse des résultats de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$, cette dernière, dans la couche de surface augmentait plus diminuait, après cela, l'analyse du FCO_2 nous montre une absorption qui augmente d'une année à une autre. Ces deux résultats prouvent bien que face à l'augmentation du CO_2 dans l'air, l'océan réagit et absorbe ce CO_2 qui lui fait augmenter la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dans la couche de surface, cette dernière baisse par la suite sous l'effet de phénomènes physiques (circulation des eaux et plonger des eaux chargées en CO_2) mais aussi biologiques; ainsi, ce qu'on peut aussi remarquer, c'est qu'une augmentation de la Chla (directement liée à une augmentation de la biomasse en phytoplancton) contribue au taux d'absorption; on remarque alors un FCO_2 en forte baisse par rapport à une augmentation de la Chla (par exemple entre 2003/2004 et 2005/2006) et un taux de FCO_2 qui se stabilise avec une baisse de la Chla (par exemple entre 2006/2007 et 2007/2008). En effet, cette relation indirecte est encore une fois causée par le fait que plus il y a de Chla plus il y a de consommation de CO_2 et donc une diminution du $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$; soit une eau plus propice à l'absorption du CO_2 atmosphérique (on remarque que la baisse de Chla est suivie par une augmentation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et vis versa).

Si l'on regarde maintenant au niveau de la saison (Figure 5.8), on peut dire que, mise à part le fait que l'augmentation du taux d'absorption augmente, le FCO_2 diminue pour toutes les années au niveau du mois de décembre puis repart à la hausse jusqu'en Mars, et cela sur tout le secteur en générale ou spécialement pour les deux régions (l'AR au sud du PF et la SAR au nord du PF). On retrouvait déjà cette distribution dans d'anciennes études sur la SAR (Metzl *et al.*, 1999) où on remarquait déjà que la période entre Octobre et Mars était marquée par une diminution puis une remontée du FCO_2 . Cette distribution saisonnière est encore une fois tout à fait comparable à celle de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (vue en Figure 4.5.(a)). On retrouve cette distribution saisonnière de la FCO_2 dans une comparaison de plusieurs approches (modèles bio-géo-chimique, observation *in situ*, modèles d'inversion du CO_2 atmosphérique, etc.) présentées dans Lenton *et al.* (2013), et dans laquelle une combinaison de plusieurs bases de données dans l'océan austral (toutes les longitudes) entre 1990 et 2009 a donné lieu à une étude comparative entre le flux de CO_2 dans les différentes longitudes de l'océan austral, comme dans Metzl *et al.* (2006) aussi (à l'ouest de notre région d'étude, vers les $\sim 60^\circ\text{E}$), et avec laquelle, on retrouve une corrélation très forte avec la tendance générale de nos résultats.

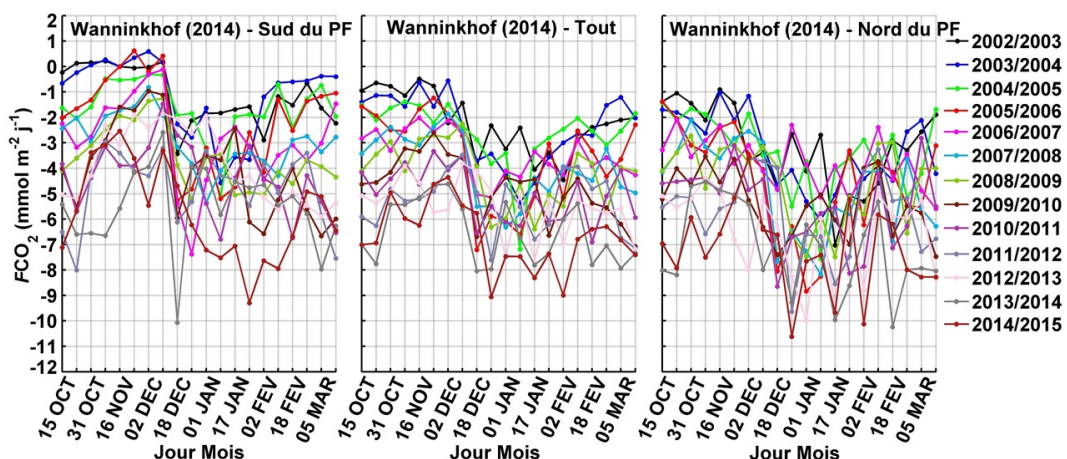


FIGURE 5.8 – Variabilité saisonnière du FCO_2 suivant l'équation de Wanninkhof (2014).

Prenons maintenant la distribution latitudinale du FCO₂ (Figure 5.9). La première remarque c'est que même si le FCO₂ diminue d'une année à une autre (comme nous l'avons montré précédemment), celui-ci a une distribution quasi-similaire vis à vis de la latitude et des différentes zones (l'augmentation du taux d'absorption touche toutes les latitudes). On retrouve encore une fois cette distribution dans Lenton *et al.* (2013) et cela pour la plupart des modèles comparés dans cette étude, mais aussi dans McNeil *et al.* (2007) où une estimation du flux est calculé en se basant sur un modèle de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ calculée en utilisant le C_T et l' A_T , ou dans d'autres longitudes de l'océan austral comme dans les travaux de Metzl *et al.* (1995, 1999, 2006), mais aussi dans l'étude globale du flux de CO₂ de l'océan austral dans Boutin *et al.* (2008), ou encore dans des travaux d'estimation globale de FCO₂ de Takahashi *et al.* (2002). Ainsi, du nord au sud, on remarque une forte absorption au niveau de la STZ et qui diminue dans la SAZ avec des moyennes de $-4,45 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ et $-2,75 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ respectivement en 2002/2003 pour atteindre les $-8,14 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ et $-6,86 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ respectivement en 2014/2015. Le comportement de du $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et donc du FCO₂ dans la STZ a été étudié dans Borges *et al.* (2007) entre 1991 et 2003 et il en a conclu que cette zone était un fort puits de CO₂, ce que nous confirmons par nos résultats. Nous rappelons que l'abondance de Chla contribue à la consommation du $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et donc à plus d'absorption. La PFZ est la zone qui est marquée par le plus bas taux d'absorption par rapport à toutes les latitudes et cela chaque année. On retrouve cette caractéristique dans toutes les cartes de FCO₂ produites ; une augmentation du $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ entraînant directement un flux moins intense. Ceci étant on passe d'une moyenne de $-0,55 \pm 1 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2002/2003 à $-4,5 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2014/2015. Dans la

POOZ puis la SFZ, on retrouve une baisse de la valeur du FCO₂ et une eau qui absorbe du CO₂ mais de façon moins intense que dans les premières zones (la STZ et la SAZ) avec des moyennes de $-1,72 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ et $-2,75 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ respectivement en 2002/2003 jusqu'à $-4,92 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ et $-6,25 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ respectivement en 2014/2015.

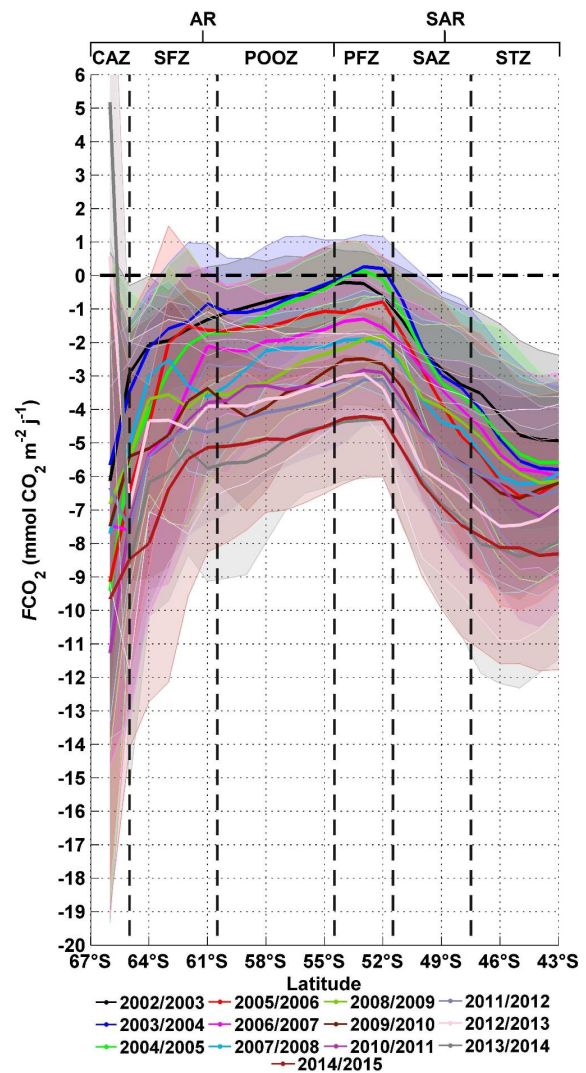


FIGURE 5.9 – Variabilité latitudinale de la distribution du FCO₂ en utilisant l'équation de Wanninkhof (2014).

Néanmoins, on remarque qu'au sud de la SFZ et dans la CAZ une tendance à la baisse entraînée par une Chla qui augmente au niveau des côtes antarctiques (Moore et Abbott, 2000) et une température des eaux plus froide. Même si dans cette zone, les données sont moins disponibles (à cause de l'extension ou la fonte de la glace) on remarque un fort puits de CO₂ comparable au puits des zones au tout au nord avec des moyennes générales qui vont de -4 ± 5 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹ en 2002/2003 à des puits allant jusqu'à -9 ± 6 mmol CO₂.m⁻².j⁻¹ en 2014/2015. Néanmoins, on note des fortes fluctuations, l'hypothèse est que la remontée des eaux chargées en CO₂ (upwelling) affecte le taux d'absorption. Toutes les autres distributions latitudinales des autres équations sont présentées en annexe G.5.

L'océan austral est incontestablement un puits de CO₂ qui permet de réguler, ou du moins freiner, l'augmentation de ce dernier dans l'atmosphère. Ce CO₂ en trop qui est absorbé n'est pas sans incident sur les propriétés physico-chimiques de l'eau ; ainsi, même si l'on a montré que l'océan austral absorbe et continue à élever son taux d'absorption au fil des années, ceci implique directement une acidification de l'eau ; avec tout les changements que cela implique sur la vie marine.

Toutes nos contributions à l'estimation et la cartographie de la SSS puis de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et enfin du calcul du FCO₂, nous ont permis de renforcer l'idée de l'acidification des eaux de l'océan antarctique à cause de l'absorption du CO₂ atmosphérique. Ce dernier étant de plus en plus élevé dans l'atmosphère, il pousse encore plus l'océan à augmenter son taux d'absorption. Les approches ainsi développées sont autant de méthodes qui permettront de contribuer à cette recherche sur l'océan austral et son rôle dans la régulation et la séquestration du CO₂ atmosphérique.

Nous concluons ainsi notre travail de thèse en présentant dans le chapitre suivant la conclusion générale ainsi que les diverses perspectives qu'ouvre notre travail pour la suite ; tant au niveau de l'analyse océanographique que du développement informatique (modélisation, interpolation, etc.). Le chapitre qui suivra ceci présentera toutes les contributions scientifiques auxquelles j'ai participé.

Chapitre 6

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

6.1 Conclusion générale

Afin de conclure cette thèse, nous allons mettre en avant et rappeler toutes les contributions apportées par nos expérimentations. Avant toute chose, nous devons préciser que tout les modèles, les validations, les tests, les résultats et enfin les cartes sont le fruit d'un ensemble de code source mis en place en utilisant le langage MATLAB[®]. Chaque étape de chaque expérience a donc un code spécifique qui permet l'automatisation de ces procédures. Ainsi, l'apport premier de ce travail a été de mettre en place ces outils en suivant l'approche développée afin d'atteindre les buts recherchés.

La question qui nous a poussé à réaliser ce travail est la suivante : " est-il possible, dans la limite des données recueillies lors de campagnes océanographiques dans l'océan austral et plus précisément dans le secteur australien, de mettre en place des outils et des mécanismes permettant d'estimer l'échange de CO₂ à la surface de l'eau ; et cela en utilisant des paramètres océanographiques mesurés par *sat* et disponibles en ligne, mais aussi, modéliser et cartographier les autres paramètres nécessaires au calcul, et cela en utilisant les données *in situ* ? ". L'idée ainsi mise en place, la suite était donc d'essayer de répondre à cette question tout en gardant à l'esprit que les procédures mises en place devait être réutilisables d'un coté, mais aussi ; que les modèles devait pouvoir être re-calibrés et/ou recalculés pour y intégrer de nouvelles données *in situ* dans le futur de façon simple. Ainsi, l'apport en programmes informatiques devient nécessaires afin de faciliter l'application de l'approche proposée.

La première étape de ce travail a été de comprendre les phénomènes océanographiques (physico-chimiques) qui agissent dans la région étudiée, ainsi que les paramètres mis à notre disposition pour étudier le comportement de ces propriétés océanographiques. Le but étant de calculer l'échange de CO₂ entre l'atmosphère et la mer, nous nous sommes donc concentré sur cette interface air-mer à la surface de l'eau. Les paramètres nécessaires à notre calcul avaient déjà fait l'objet d'études depuis plusieurs décennies et des formules ont été mises en place pour faire cela. Les paramètres ainsi retenus sont : la température, la salinité, la fugacité du CO₂ de l'eau dans la couche de surface, la fugacité du CO₂ dans la masse d'air en contact avec l'eau et la vitesse du vent.

La seconde étape était de voir la disponibilité des données *sat* en terme de couverture spa-

tiale et temporelle mais aussi les paramètres mesurés par ces satellites. Ainsi, pour notre travail, nous avons retenue plusieurs produits émanant de différents satellites tel que la température de MODIS_{Aqua} et la vitesse du vent d'ASCAT, etc. Par contre, pour certains autres paramètres, nous avons dû les modéliser puis les interpoler sur notre région ; ainsi, le premier paramètre sur lequel nous nous sommes penchés était la salinité. Ce paramètre n'a commencé à être estimé de façon globale par *sat* que jusqu'à très récemment ; le fait est que nous avons travaillé sur la période entre 2002 et 2015 nous a donc poussé à estimer la SSS sur toutes ces années. C'est ainsi qu'un modèle de SSS a été mis en place ; dans ce dernier, nous avons retenue la relation directe qu'avait la SSS vis à vis de la SST et de la *lat*. Une équation correspondante à chaque période du printemps à l'été austral (R0, R2 et R4) a été développée en utilisant la régression linéaire multiple (avec une erreur globale de $\pm 0,16$ face aux données *sat*). Grâce à cela, nous avons pu cartographier la SSS sur cette période entre 2002 et 2015. La SSS cartographiée, nous nous sommes penchés par la suite sur la fugacité du CO₂ dans l'eau ; cette dernière n'étant pas disponible directement par des données *sat*, il était plus que nécessaire de trouver un moyen de la modéliser. Nous avons donc commencé par étudier les paramètres disponibles par *sat* et dont la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ dépend. Après quelques expérimentations, le choix s'est porté sur la température et la Chla (toutes les deux données par MODIS_{Aqua}). Dans cette deuxième expérience de modélisation, nous avons choisi d'utiliser les réseaux de neurones et plus précisément les FNNs très réputés pour les problèmes de régression non linéaire. Comme pour la SSS, trois FNNs correspondants aux trois périodes décrites précédemment ont été développés (une erreur globale de $\pm 9,45 \mu\text{atm}$ a été obtenue face aux données *sat*), et une nouvelle fois, ceci a été suivi de la cartographie de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ du printemps à l'été austral entre 2002 et 2015.

Grâce aux deux contributions présentées dans le paragraphe précédent, nous avons donc pu avoir en main de quoi calculer le flux de CO₂ en utilisant les données *sat* et les données estimées puis cartographiées par nos modèles. Ainsi, un calcul comparatif du FCO₂ a été fait (une fois avec des données *in situ*, et une fois avec les données *sat* et estimées), et le résultat a montré qu'il était tout à fait possible de calculer ce FCO₂ et donc de le cartographier.

Les cartes du flux ainsi calculées nous ont permis d'analyser le comportement de l'océan (plus précisément la couche de surface) vis à vis de l'augmentation du CO₂ dans l'atmosphère. Les résultats nous ont montré que cette région du globe représentait un puits de CO₂, mais que plus encore, cette aptitude à absorber le CO₂ se renforçait d'une année à une autre (toujours du printemps à l'été austral). Au jour d'aujourd'hui, nous pouvons constater que cette région absorbe de plus en plus le CO₂ de l'atmosphère, mais cela n'est pas sans conséquences sur le milieu marin ; nous avons dans l'analyse des données montré comment le pH baissait d'une année à une autre. Comme nous l'avons expliqué dans les généralités, ces deux phénomènes sont directement liés. Ainsi, on se retrouve avec des eaux de surface plus acides qui menacent probablement la survie à long-terme de beaucoup d'espèces marines, voir même, perturber la chaîne alimentaire marine et altérer la biogéochimie des océans. Ce travail a donc eu pour but de contribuer à l'estimation du facteur clé qui entraîne cette acidification pour qu'à terme nous puissions mettre des chiffres et des conclusions claires de ces effets sur l'environnement de façon prévisible et compréhensible.

En conclusion, nous mettons en avant l'apport qu'a pu apporter l'utilisation des données *sat* en terme de couverture spatio-temporelle, ainsi, le travail de modélisation puis d'utilisation de données *sat* des différents paramètres océanographiques nous a montré qu'il était tout à fait

possible d'utiliser ces données afin de calculer le FCO_2 , et cela en utilisant différentes méthodes de modélisation (pour les données peu/pas disponible avec une précision suffisante ; soit la RLM pour la SSS et FNN pour la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$). Nos résultat de modélisation et de calcul des différences entre l'utilisation des données *sat* et *in situ* ont permit d'avoir des incertitudes acceptables au vu du but recherché. Le travail sur l'amélioration des résultats est donc ouvert à d'autres perspectives futures. Les champs de ces perspectives sont diverses et variés, nous présentons dans la section suivante les différents points qui nous semblent intéressants à étudier et qui peuvent apporter une plus value aux résultats présentés dans ce travail.

6.2 Perspective en modélisation

6.2.1 Comparaison avec d'autres produits

Les cartes obtenues grâce à nos modèles sont issue de données *in situ* dans la région, néanmoins, il faudrait comparer ces cartes avec différents produits tel que des modèles d'assimilation ou des produit d'autres modèles. Ce travail doit tout d'abord avoir lieu en produisant des cartes avec d'autres échelles temporelles des fois, mais aussi la conversion des résultats vers d'autres unités. Cette comparaison permettra de se positionner vis à vis des modèles disponibles et la couverture spatio-temporelle qu'ils proposent, mais aussi de venir contribuer à la quantification de tel ou tel paramètre (pour notre cas, la SSS, la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ et le FCO_2).

6.2.2 Classification de la zone d'étude

Dans le travail présenté, même si nous avons décrit les différents fronts qui délimitent les différentes régions, nous avons considéré une seul masse d'eau pour les modèles en incluant la latitude comme information sur le positionnement. Comme perspective a ce travail, nous pouvons proposer de reprendre l'approche développée, mais en effectuant à priori une classification de la zone. Nous pouvons, entre autre, utiliser des algorithmes de classification comme le K-means ou les SOM (Self Organization Map) ou même les FNNs qui, en utilisant les données *sat*, peuvent prendre en considération différents paramètres en combinaison (par exemple température et chlorophylle) pour délimiter des fronts ; cela suivant chaque périodes de chaque saison. Nous pouvons prendre l'exemple de la figure 6.1 qui présente une classification en trois zones en appliquant la méthode K-means sur des images *sat* de température. La classification permet de regrouper les régions dont les paramètres océanographiques ont une très forte corrélation entre eux ; de ce fait, les équations et modèles produits pourront être plus efficace en terme d'erreur.

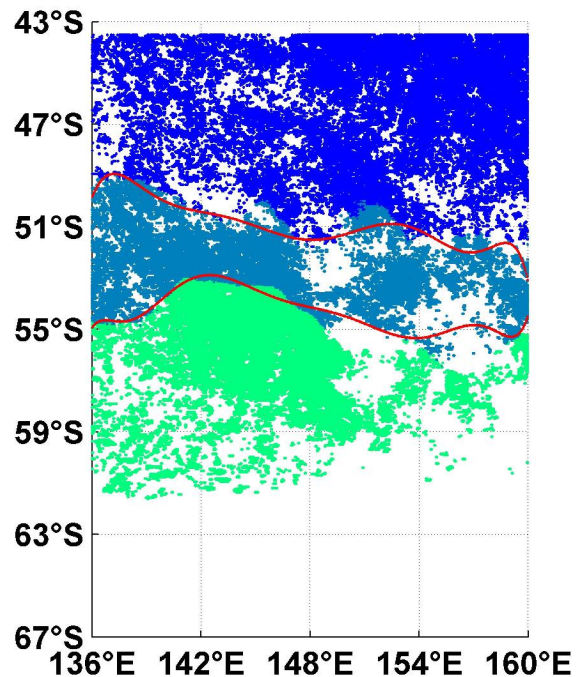


FIGURE 6.1 – Exemple de classification de la région d'étude en trois classes.

6.2.3 RLM et RN

Dans cette thèse, nous avons montré comment nous avons procédé pour mettre en place les modèles de salinité (Par les RLM) et la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (en utilisant les RNs de type FNN). Comme perspective à ce travail, il serait possible d'aller plus loin dans ce travail dans le sens où :

- Pour la salinité : nous pouvons partir du principe qu'on pourrait prendre en considération d'autres paramètres géographiques et océanographiques ; par exemple la longitude : en prenant en compte d'autres données *in situ* d'autres longitudes sur l'océan austral et étendre ainsi le modèle sur une plus vaste région (on pourrait commencer par comparer le modèle en l'utilisant tel quel sur d'autres longitudes puis voir l'importance de l'information que peut rajouter la longitude dans le modèle). Pour les paramètres océanographiques, on peut aussi prendre en considération les précipitations qui apportent de l'eau douce à la couche de surface ou bien à l'évaporation qui elle, contribue à l'augmentation de la salinité (en analysant l'importance de chacun) ; à noter que ces paramètres sont disponibles par satellites ou par des produits de type climatologie.
- Pour la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$: Nous avons utilisé un type de réseau de neurones avec une règle d'apprentissage suivant un algorithme précis (le LMA). Il est donc possible d'aller vers d'autres types de réseaux ; par exemple avec plusieurs couches cachées ou changer le type des connexions d'une couche à une autre. Les possibilités sont diverses, et une étude comparative pourrait apporter une plus value intéressante à ce travail.

Autre chose, nous avons choisi de montrer l'utilisation de la RLM pour la SSS et les FNNs pour la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ mais nous pouvons tout à fait faire le contraire en appliquant d'autres combinaisons.

6.2.4 Utilisation d'autres Produits *sat*

Dans cette thèse, nous avons appliqué nos expérimentations sur des données *sat* produites par un certain nombre de satellites. Il serait donc très intéressant d'appliquer notre approche sur d'autres produits *sat* afin de voir les différences entre l'utilisation de tel ou tel satellite pour tel ou tel paramètre océanographique.

6.3 Perspective en cartographie

6.3.1 Interpolation des images produites

Comme perspective vis à vis de nos cartes produites par les modèles développés, nous proposons la méthode DIVA (Data-Interpolating Variational Analysis, <http://modb.oce.ulg.ac.be/mediawiki/index.php/DIVA>) qui permet d'interpoler les images afin de couvrir les surfaces où les données *sat* ne sont pas disponibles (Troupin *et al.*, 2012). Cette méthode, très utilisée en océanographie pour la cartographie en utilisant les données *in situ* mais aussi pour la reconstruction d'images incomplètes (Beckers *et al.*, 2013), permet d'avoir une couverture spatiale beaucoup plus importante en utilisant les données *sat*. La figure 6.2 présente un exemple d'utilisation de la méthode DIVA.

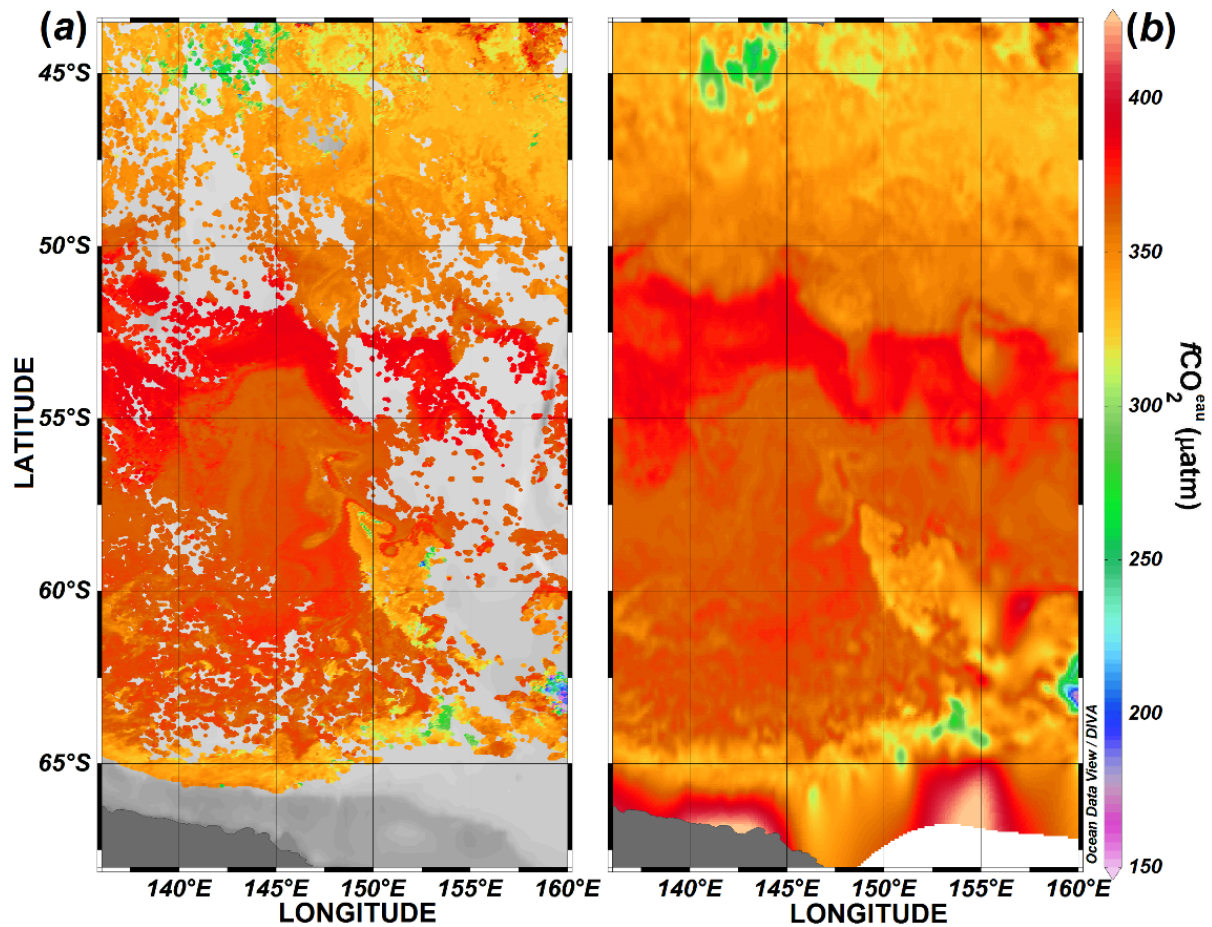


FIGURE 6.2 – Interpolation d’une image de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ en utilisant la méthode DIVA, (a) : Image de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ produite par nos modèles, (b) : Image interpolé de (a) en utilisant la méthode DIVA.

Une autre méthode aussi très utilisée et qui sert à la reconstruction d’image satellite : DI-NEOF (Data Interpolating Empirical Orthogonal Functions) a fait ses preuves dans différents cas d’interpolation d’images de SST (Alvera-Azcárate *et al.*, 2005; Beckers *et al.*, 2006; Alvera-Azcárate *et al.*, 2007; Beckers *et al.*, 2014). Par la suite, cette méthode a été enrichie par l’intégration de processus permettant d’étudier la corrélation des points à interpoler et la détection des valeurs aberrantes (Alvera-Azcárate *et al.*, 2009, 2011, 2012).

6.3.2 Cartographie sur d'autres échelles de temps

Afin de comparer plus encore avec d'autres résultats, nous pouvons aussi appliquer nos modèles sur des images mensuelles et ainsi avoir le flux global sur un mois, la figure en 6.3 présente un exemple. Nous pouvons aussi par la suite proposer le FCO_2 avec d'autres unités de mesure (par exemple en Gramme de CO_2 ou Gramme de C par jour ou par mois)

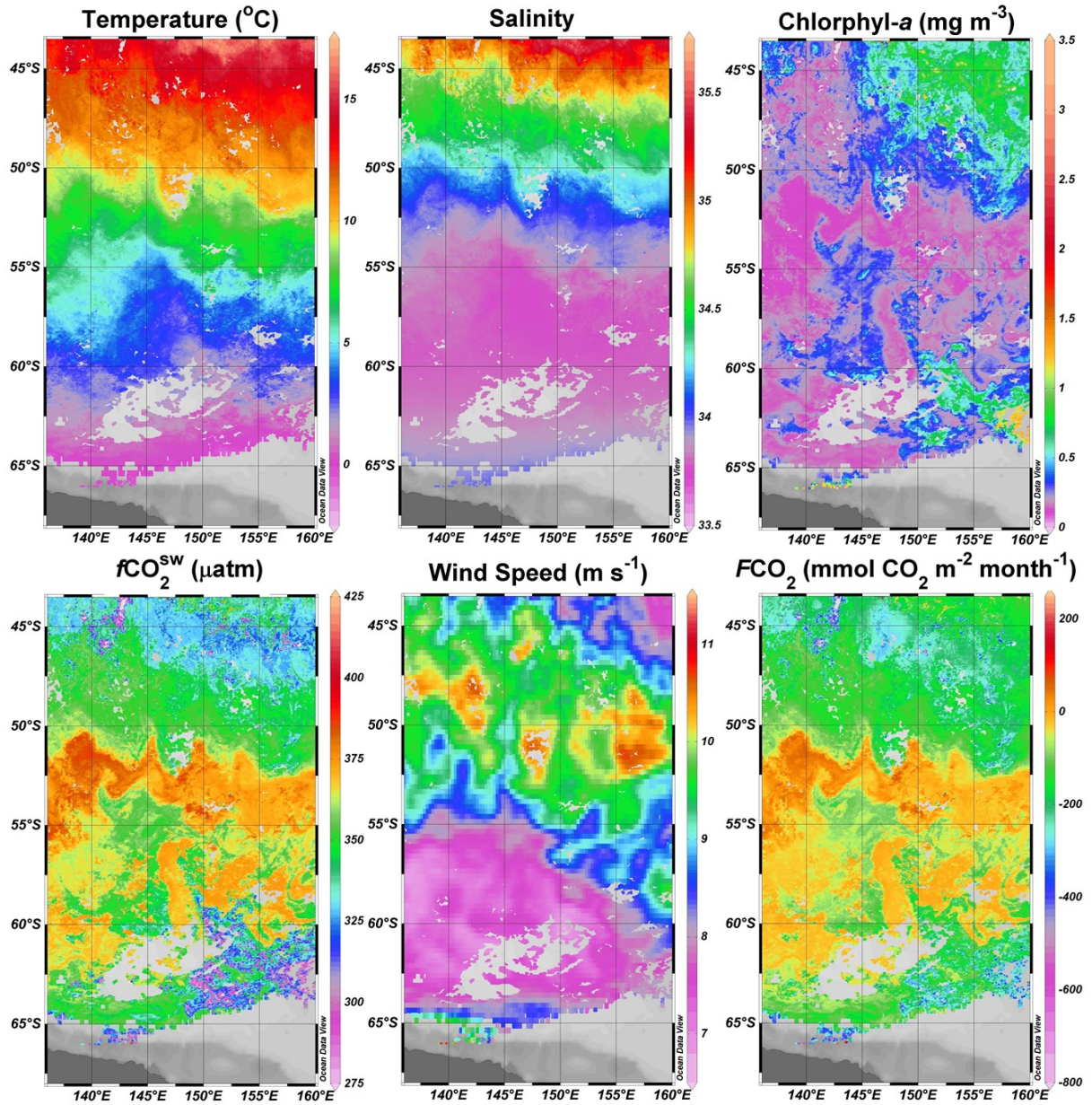


FIGURE 6.3 – Exemple d'application des modèles développés sur des images mensuelles (Janvier 2005).

Bibliographie

- ALVERA-AZCÁRATE, A., BARTH, A., BECKERS, J.-M. et WEISBERG, R. H. (2007). Multivariate reconstruction of missing data in sea surface temperature, chlorophyll, and wind satellite fields. *Journal of Geophysical Research*, 112(C3). doi : 10.1029/2006JC003660.
- ALVERA-AZCÁRATE, A., BARTH, A., RIXEN, M. et BECKERS, J.-M. (2005). Reconstruction of incomplete oceanographic data sets using empirical orthogonal functions : application to the Adriatic Sea surface temperature. *Ocean Modelling*, 9(4):325–346. doi : 10.1016/j.ocemod.2004.08.001.
- ALVERA-AZCÁRATE, A., BARTH, A., SIRJACOBS, D. et BECKERS, J.-M. (2009). Enhancing temporal correlations in EOF expansions for the reconstruction of missing data using DINEOF. *Ocean Science*, 5(4):475–485. doi : 10.5194/os-5-475-2009.
- ALVERA-AZCÁRATE, A., BARTH, A., SIRJACOBS, D., LENARTZ, F. et BECKERS, J.-M. (2011). Data Interpolating Empirical Orthogonal Functions (DINEOF) : a tool for geophysical data analyses. *Mediterranean Marine Science, International Conference on Marine Data and Information Systems - IMDIS*, pages 5–11. <http://hdl.handle.net/2268/87104>.
- ALVERA-AZCÁRATE, A., SIRJACOBS, D., BARTH, A. et BECKERS, J.-M. (2012). Outlier detection in satellite data using spatial coherence. *Remote Sensing of Environment*, 119:84–91. doi : 10.1016/j.rse.2011.12.009.
- AÏT-AMEUR, N. (2007). *Contribution à la quantification du CO₂ anthropique en mer Méditerranée et en mer de Ross*. Thèse de doctorat, Université de Perpignan Via Domitia, Perpignan, France.
- AÏT-AMEUR, N. et GOYET, C. (2006). Distribution and transport of natural and anthropogenic CO₂ in the Gulf of Cádiz. *Deep Sea Research Part II : Topical Studies in Oceanography*, 53(11–13):1329–1343. doi : 10.1016/j.dsr2.2006.04.003.
- BECKERS, J.-M., BARTH, A. et ALVERA-AZCÁRATE, A. (2006). DINEOF reconstruction of clouded images including error maps? application to the Sea-Surface Temperature around Corsican Island. *Ocean Science*, 2(2):183–199. doi : 10.5194/os-2-183-2006.
- BECKERS, J.-M., BARTH, A., TOMAZIC, I. et ALVERA-AZCÁRATE, A. (2014). A method to generate fully multi-scale optimal interpolation by combining efficient single process analyses, illustrated by a DINEOF analysis spiced with a local optimal interpolation. *Ocean Science*, 10(5):845–862. doi : 10.5194/os-10-845-2014.

- BECKERS, J.-M., BARTH, A., TROUPIN, C. et ALVERA-AZCÁRATE, A. (2013). Approximate and Efficient Methods to Assess Error Fields in Spatial Gridding with Data Interpolating Variational Analysis (DIVA). *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 31(2):515–530. doi : 10.1175/JTECH-D-13-00130.1.
- BELKIN, I. M. et GORDON, A. L. (1996). Southern Ocean fronts from the Greenwich meridian to Tasmania. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 101(C2):3675–3696. doi : 10.1029/95JC02750.
- BENALLAL, M., MOUSSA, H., TOURATIER, F., GOYET, C. et POISSON, A. (2016a). Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean. *Antarctic Science*, 28(02):127–134. doi : 10.1017/S0954102015000516.
- BENALLAL, M. A., MOUSSA, H., LENCINA-AVILA, J. M., EL JAI, M. C., TOURATIER, F., GOYET, C., POISSON, A. et POISSON, N. (2016b). Satellite-derived CO₂ flux in the surface seawater of the austral ocean south of Australia. *Soumit dans International Journal of Remote Sensing*.
- BENALLAL ET MOUSSA (2011). *Reconnaissance des empreintes digitales en utilisant les réseaux de neurones impulsifs*. Mémoire de licence en informatique, Université des sciences et de la technologie d'ORAN USTOMB, Oran, ALGERIE.
- BODEN, T.A., ANDRES, R.J. et MARLAND, G. (2015). Global, Regional, and National Fossil-Fuel CO₂ Emissions. Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, U.S. Department of Energy, Oak Ridge, Tenn., U.S.A. doi : 10.3334/C-DIAC/00001_V2015.
- BORGES, A. V. (2011). Present Day Carbon Dioxide Fluxes in the Coastal Ocean and Possible Feedbacks Under Global Change. In DUARTE, P. et SANTANA-CASIANO, J. M., éditeurs : *Oceans and the Atmospheric Carbon Content*, pages 47–77. Springer Netherlands, Dordrecht. doi : 10.1007/978-90-481-9821-4_3.
- BORGES, A. V., TILBROOK, B., METZL, N., LENTON, A. et DELILLE, B. (2007). Inter-annual variability of the carbon dioxide oceanic sink south of Tasmania. *Biogeosciences Discussions*, 4(5):3639–3671. doi : 10.5194/bg-5-141-2008.
- BOUTIN, J., MARTIN, N., REVERDIN, G., YIN, X. et GAILLARD, F. (2013). Sea surface freshening inferred from SMOS and ARGO salinity : impact of rain. *Ocean Sci.*, 9(1):183–192. doi : 10.5194/os-9-183-2013.
- BOUTIN, J., MERLIVAT, L., HÉNOQC, C., MARTIN, N. et SALLÉE, J. B. (2008). Air-sea CO₂ flux variability in frontal regions of the Southern Ocean from CARbon Interface Ocean Atmosphere drifters. *Limnology and Oceanography*, 53(5part2):2062–2079. doi : 10.4319/lo.2008.53.5_part_2.2062.
- BREVIERE, E. (2005). *Variabilités temporelles des flux de CO₂ à l'interface air-mer dans l'océan Indien et Austral au sud de la Tasmanie*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- BROECKER, W. S., PEACOCK, S. L., WALKER, S., WEISS, R., FAHRBACH, E., SCHROEDER, M., MIKOLAJEWICZ, U., HEINZE, C., KEY, R., PENG, T.-H. et RUBIN, S. (1998). How much

- deep water is formed in the Southern Ocean? *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 103(C8):15833–15843. doi : 10.1029/98JC00248.
- CAI, W.-J., HU, X., HUANG, W.-J., MURRELL, M. C., LEHRTER, J. C., LOHRENZ, S. E., CHOU, W.-C., ZHAI, W., HOLLIBAUGH, J. T., WANG, Y., ZHAO, P., GUO, X., GUNDERSEN, K., DAI, M. et GONG, G.-C. (2011). Acidification of subsurface coastal waters enhanced by eutrophication. *Nature Geoscience*, 4(11):766–770. doi : 10.1038/ngeo1297.
- CHAIGNEAU, A. et MORROW, R. (2002). Surface temperature and salinity variations between Tasmania and Antarctica, 1993–1999. *Journal of Geophysical Research : Oceans (1978–2012)*, 107(C12):SRF–22. doi : 10.1029/2001JC000808.
- CHEN, F., CAI, W.-J., BENITEZ-NELSON, C. et WANG, Y. (2007). Sea surface pCO₂-SST relationships across a cold-core cyclonic eddy : Implications for understanding regional variability and air-sea gas exchange. *Geophysical Research Letters*, 34(10):L10603. doi : 10.1029/2006GL028058.
- CHEVALIER, P. (1999). Les ondes hyperfréquences. In *Les hyperfréquences : propriétés et applications*. [http ://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hyper.html](http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hyper/hyper.html).
- CHIERICI, M., SIGNORINI, S. R., MATTSDOTTER-BJÖRK, M., FRANSSON, A. et OLSEN, A. (2012). Surface water fCO₂ algorithms for the high-latitude Pacific sector of the Southern Ocean. *Remote Sensing of Environment*, 119:184–196. doi : 10.1016/j.rse.2011.12.020.
- COMMISSION GÉNÉRALE DE TERMINOLOGIE ET DE NÉOLOGIE (2013). *Vocabulaire des sciences et techniques spatiales*. [http ://www.culture.fr/Ressources/FranceTerme/Actualites/Sciences-et-techniques-spatiales](http://www.culture.fr/Ressources/FranceTerme/Actualites/Sciences-et-techniques-spatiales).
- COPIN-MONTEGUT, C. (1988). A new formula for the effect of temperature on the partial pressure of CO₂ in seawater. *Marine Chemistry*, 25(1):29–37. doi : 10.1016/0304-4203(88)90012-6.
- COSCA, C. E., FEELY, R. A., BOUTIN, J., ETCHETO, J., MCPHADEN, M. J., CHAVEZ, F. P. et STRUTTON, P. G. (2003). Seasonal and interannual CO₂ fluxes for the central and eastern equatorial Pacific Ocean as determined from fCO₂-SST relationships. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 108(C8):3278. doi : 10.1029/2000JC000677.
- CYBENKO, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals and Systems*, 2(4):303–314. doi : 10.1007/BF02551274.
- DE VILLIERS, J. et BARNARD, E. (1993). Backpropagation neural nets with one and two hidden layers. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 4(1):136–141. doi : 10.1109/72.182704.
- DEACON, G. E. R. (1982). Physical and biological zonation in the Southern Ocean. *Deep Sea Research Part A. Oceanographic Research Papers*, 29(1):1–15. doi : 10.1016/0198-0149(82)90058-9.
- DICKSON, A. G. (1981). An exact definition of total alkalinity and a procedure for the estimation of alkalinity and total inorganic carbon from titration data. *Deep Sea Research Part A. Oceanographic Research Papers*, 28(6):609–623. doi : 10.1016/0198-0149(81)90121-7.

- DIENER, F. et DIENER, M. (2007). Méthode des moindres carrés. In *Mathématiques Appliquées à la Biologie LSV1, 2007-2008, 1er semestre*, pages 33–38. Université de Nice - Sophia Antipolis. <http://math.unice.fr/~diener>.
- DLUGOKENCKY et TANS, P. (2016). Trends in Atmospheric Carbon Dioxide. NOAA/ESRL. <http://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/global.html>.
- DOE (1994). Handbook of Methods for the Analysis of the Various Parameters of the Carbon Dioxide System in Sea Water. Version 2. Rapport technique ORNL/CDIAC-74, Oak Ridge National Lab., TN (United States). <http://cdiac.ornl.gov/oceans/handbook.html>.
- DONEY, S. C., MAHOWALD, N., LIMA, I., FEELY, R. A., MACKENZIE, F. T., LAMARQUE, J.-F. et RASCH, P. J. (2007). Impact of anthropogenic atmospheric nitrogen and sulfur deposition on ocean acidification and the inorganic carbon system. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(37):14580–14585. doi : 10.1073/pnas.0702218104.
- DUPONT, S. et PÖRTNER, H.-O. (2013). A snapshot of ocean acidification research. *Marine Biology*, 160(8):1765–1771. doi : 10.1007/s00227-013-2282-9.
- FUNAHASHI, K.-I. (1989). On the approximate realization of continuous mappings by neural networks. *Neural Networks*, 2(3):183–192. doi : 10.1016/0893-6080(89)90003-8.
- GATTUSO, J.-P. et HANSSON, L. (2011). *Ocean Acidification*. Oxford University Press. ISBN : 9780199591091.
- GATTUSO, J.-P. et LAVIGNE, H. (2009). Technical Note : Approaches and software tools to investigate the impact of ocean acidification. *Biogeosciences*, 6(10):2121–2133. doi : 10.5194/bg-6-2121-2009.
- GORDON, L. I. et JONES, L. B. (1973). The effect of temperature on carbon dioxide partial pressures in seawater. *Marine Chemistry*, 1(4):317–322. doi : 10.1016/0304-4203(73)90021-2.
- GOYET, C. (2013). Valorisation des résultats des campagnes océanographiques en série. Rapport technique, IMAGES, UPVD. <http://www.flotteoceanographique.fr/Campagnes-scientifiques/Campagnes-hauturieres/Bilans-des-campagnes-realisees/Fiches-de-valorisation-des-campagnes/Campagnes-2011-a-2020/Campagnes-2013>.
- GOYET, C., MILLERO, F. J., POISSON, A. et SHAFER, D. K. (1993). Temperature dependence of CO₂ fugacity in seawater. *Marine Chemistry*, 44(2):205–219. doi : 10.1016/0304-4203(93)90203-Z.
- GOYET, C. et POISSON, A. (1989). New determination of carbonic acid dissociation constants in seawater as a function of temperature and salinity. *Deep Sea Research Part A. Oceanographic Research Papers*, 36(11):1635–1654. doi : 10.1016/0198-0149(89)90064-2.
- HACHEM D. (2009). *Reconnaissance Labiale (Lipreading) Par Réseaux De Neurones Impulsionnels*. Mémoire d'ingénieur, Université des sciences et de la technologie d'ORAN USTOMB, Oran, ALGERIE.

- HO, D. T., LAW, C. S., SMITH, M. J., SCHLOSSER, P., HARVEY, M. et HILL, P. (2006). Measurements of air-sea gas exchange at high wind speeds in the Southern Ocean : Implications for global parameterizations. *Geophysical Research Letters*, 33(16). doi : 10.1029/2006GL026817.
- HO, D. T., WANNINKHOF, R., SCHLOSSER, P., ULLMAN, D. S., HEBERT, D. et SULLIVAN, K. F. (2011). Toward a universal relationship between wind speed and gas exchange : Gas transfer velocities measured with $^3\text{He}/\text{SF}_6$ during the Southern Ocean Gas Exchange Experiment. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 116(C4):C00F04. doi : 10.1029/2010JC006854.
- HORNIK, K., STINCHCOMBE, M. et WHITE, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366. doi : 10.1016/0893-6080(89)90020-8.
- IAPSO WORKING GROUP ON SYMBOLS, UNITS, AND NOMENCLATURE IN PHYSICAL OCEANOGRAPHY. (1985). *The International System of Units (SI) in oceanography : report of IAPSO Working Group on Symbols, Units, and Nomenclature in Physical Oceanography (SUN)*. Unesco, Paris.
- INOUE, H. Y., ISHII, M., MATSUEDA, H., KAWANO, T., MURATA, A. et TAKASUGI, Y. (2003). Distribution of the partial pressure of CO_2 in surface water (pCO_2^w) between Japan and the Hawaiian Islands : pCO_2^w -SST relationship in the winter and summer. *Tellus B*, 55(2):456–465. doi : 10.1034/j.1600-0889.2003.01482.x.
- INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE, éditeur (2014). *Climate Change 2013 - The Physical Science Basis : Working Group I Contribution to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, Cambridge. doi : 10.1017/CBO9781107415324.
- IRIE, B. et MIYAKE, S. (1988). Capabilities of three-layered perceptrons. In , *IEEE International Conference on Neural Networks, 1988*, pages 641–648 vol.1. doi : 10.1109/ICNN.1988.23901.
- JACOBSON, M. Z. (2005). Studying ocean acidification with conservative, stable numerical schemes for nonequilibrium air-ocean exchange and ocean equilibrium chemistry. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 110(D7):D07302. doi : 10.1029/2004JD005220.
- JEAN-BAPTISTE, P., FOURRÉ, E. et POISSON, A. (2002). Gas Transfer Velocities for ^3He in a Lake at High Wind Speeds. In DONELAN, M. A., M.ENNAN, W., SALTZMAN, E. S. et WANNINKHOF, R., éditeurs : *Gas Transfer at Water Surfaces*, pages 233–238. American Geophysical Union. doi : 10.1029/GM127p0233.
- LADJADJ, R. (2002). Les réseaux de neurones. Institut d'électronique et d'informatique Gaspard-Monge (IGM). <http://www-igm.univ-mlv.fr/~dr/XPOSE2002/Neurones/index.php?rubrique=Accueil>.
- LAIKA, H., GOYET, C., VOUVE, F., POISSON, A. et TOURATIER, F. (2009). Interannual properties of the CO_2 system in the Southern Ocean south of Australia. *Antarctic Science*, 21(06):663. doi : 10.1017/S0954102009990319.
- LAIKA, H. E. (2008). *Variations spatio-temporelles du flux de dioxyde de carbone à l'interface air-mer dans l'océan Antarctique*. Thèse de doctorat, Perpignan. <http://www.theses.fr/2008PERP0857>.

- LE QUÉRÉ, C., ORR, J. C., MONFRAY, P., AUMONT, O. et MADEC, G. (2000). Interannual variability of the oceanic sink of CO₂ from 1979 through 1997. *Global Biogeochemical Cycles*, 14(4):1247–1265. doi : 10.1029/1999GB900049.
- LEFÈVRE, N. et TAYLOR, A. (2002). Estimating pCO₂ from sea surface temperatures in the Atlantic gyres. *Deep Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 49(3):539–554. doi : 10.1016/S0967-0637(01)00064-4.
- LEFÈVRE, N., URBANO, D. F., GALLOIS, F. et DIVERRÈS, D. (2014). Impact of physical processes on the seasonal distribution of the fugacity of CO₂ in the western tropical Atlantic : FCO₂ in the western tropical atlantic. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 119(2):646–663. doi : 10.1002/2013JC009248.
- LEFÈVRE, N., WATSON, A. J. et WATSON, A. R. (2005). A comparison of multiple regression and neural network techniques for mapping in situ pCO₂ data. *Tellus B*, 57(5):375–384. doi : 10.1111/j.1600-0889.2005.00164.x.
- LENTON, A., TILBROOK, B., LAW, R. M., BAKKER, D., DONEY, S. C., GRUBER, N., ISHII, M., HOPPEMA, M., LOVENDUSKI, N. S., MATEAR, R. J., MCNEIL, B. I., METZL, N., MIKALOFF FLETCHER, S. E., MONTEIRO, P. M. S., RÖDENBECK, C., SWEENEY, C. et TAKAHASHI, T. (2013). Sea–air CO₂ fluxes in the Southern Ocean for the period 1990–2009. *Biogeosciences*, 10(6):4037–4054. doi : 10.5194/bg-10-4037-2013.
- LEVENBERG, K. (1944). A Method for the Solution of Certain Non-Linear Problems in Least Squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, pages 164–168. <http://www.jstor.org/stable/43633451>.
- LILLESAND, T., KIEFER, R. W. et CHIPMAN, J. (2008). *Remote Sensing and Image Interpretation*. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 6th edition édition. ISBN : 9780470052457.
- LISS, P. S. et MERLIVAT, L. (1986). Air-Sea Gas Exchange Rates : Introduction and Synthesis. In BUAT-MÉNARD, P., éditeur : *The Role of Air-Sea Exchange in Geochemical Cycling*, numéro 185 de NATO ASI Series, pages 113–127. Springer Netherlands. ISBN : 9789401086066 - 9789400947382.
- LOUANCHI, F. et HOPPEMA, M. (2000). Interannual variations of the Antarctic Ocean CO₂ uptake from 1986 to 1994. *Marine Chemistry*, 2-4(72):103–114. doi : 10.1016/S0304-4203(00)00076-1.
- LUMPKIN, R. et SPEER, K. (2007). Global Ocean Meridional Overturning. *Journal of Physical Oceanography*, 37(10):2550–2562. doi : 10.1175/JPO3130.1.
- MADSEN, K., NIELSEN, H. B. et TINGLEFF, O. (2004). *Methods for non-linear least squares problems (2nd ed.)*. Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, DTU.
- MARQUARDT, D. (1963). An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11(2):431–441. doi : 10.1137/0111030.

- MATEAR, R. J. et LENTON, A. (2008). Impact of Historical Climate Change on the Southern Ocean Carbon Cycle. *Journal of Climate*, 21(22):5820–5834. doi : 10.1175/2008JCLI2194.1.
- MATHIS, J., COOLEY, S., YATES, K. et WILLIAMSON, P. (2015). Introduction to this Special Issue on Ocean Acidification : The Pathway from Science to Policy. *Oceanography*, 28(2):10–15. doi : 10.5670/oceanog.2015.26.
- MCCULLOCH, W. S. et PITTS, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, 5(4):115–133. doi : 10.1007/BF02478259.
- MCNEIL, B. I., METZL, N., KEY, R. M., MATEAR, R. J. et CORBIERE, A. (2007). An empirical estimate of the Southern Ocean air-sea CO₂ flux. *Global Biogeochemical Cycles*, 21(3):GB3011. doi : 10.1029/2007GB002991.
- METZL, N., BRUNET, C., JABAUD-JAN, A., POISSON, A. et SCHAUER, B. (2006). Summer and winter air-sea CO₂ fluxes in the Southern Ocean. *Deep Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 53(9):1548–1563. doi : 10.1016/j.dsr.2006.07.006.
- METZL, N., POISSON, A., LOUANCHI, F., BRUNET, C., SCHAUER, B. et BRES, B. (1995). Spatio-temporal distributions of air-sea fluxes of CO₂ in the Indian and Antarctic oceans. *Tellus B*, 47(1-2):56–69. doi : 10.1034/j.1600-0889.47.issue1.7.x.
- METZL, N., TILBROOK, B. et POISSON, A. (1999). The annual fCO₂ cycle and the air-sea CO₂ flux in the sub-Antarctic Ocean. *Tellus B*, 51(4):849–861. doi : 10.1034/j.1600-0889.1999.t01-3-00008.x.
- MONACO, Patrick, A. P. (2014). *Vulnérabilité du système océanique*. ISTE, London, collection mer et océan édition. ISBN : 9781784050016.
- MOORE, J. K. et ABBOTT, M. R. (2000). Phytoplankton chlorophyll distributions and primary production in the Southern Ocean. *Journal of Geophysical Research : Oceans (1978–2012)*, 105(C12):28709–28722. 10.1029/1999JC000043.
- MORROW, R. et KESTENARE, E. (2014). Nineteen-year changes in surface salinity in the Southern Ocean south of Australia. *Journal of Marine Systems*, 129:472–483. doi : 10.1016/j.jmarsys.2013.09.011.
- MOUSSA, H., BENALLAL, M. A., GOYET, C., LEFEVRE, N., EL JAI, M. C., GUGLIELMI, V. et TOURATIER, F. (2015). A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data. *ESAIM : Proceedings and Surveys*, 49:65–77. doi : 10.1051/proc/201549006.
- MOUSSA, H., BENALLAL, M. A., GOYET, C. et LEFÈVRE, N. (2016). Satellite-derived CO₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic Ocean using a feedforward neural network. *International Journal of Remote Sensing*, 37(3):580–598. doi : 10.1080/01431161.2015.1131872.
- MURPHY, D. M., THOMSON, D. S., MIDDLEBROOK, A. M. et SCHEIN, M. E. (1998). In situ single-particle characterization at Cape Grim. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 103(D13):16485–16491. doi : 10.1029/97JD03281.

- NASA GODDARD SPACE FLIGHT CENTER, OCEAN ECOLOGY LABORATORY, OCEAN BIOLOGY PROCESSING GROUP (2014). MODIS-Aqua Ocean Color Data. Rapport technique, NASA Goddard Space Flight Center, Ocean Ecology Laboratory, Ocean Biology Processing Group. doi : 10.5067/AQUA/MODIS_OC.2014.0.
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL (2000). *The Role of Small Satellites in NASA and NOAA Earth Observation Programs*. doi : 10.17226/9819.
- NIGHTINGALE, P. D., MALIN, G., LAW, C. S., WATSON, A. J., LISS, P. S., LIDDICOAT, M. I., BOUTIN, J. et UPSTILL-GODDARD, R. C. (2000). In situ evaluation of air-sea gas exchange parameterizations using novel conservative and volatile tracers. *Global Biogeochemical Cycles*, 14(1):373–387. doi : 10.1029/1999GB900091.
- NOMURA, D., YOSHIKAWA-INOUE, H., KOBAYASHI, S., NAKAOKA, S., NAKATA, K. et HASHIDA, G. (2014). Winter-to-summer evolution of pCO₂ in surface water and air-sea CO₂ flux in the seasonal ice zone of the Southern Ocean. *Biogeosciences*, 11(20):5749–5761. doi : 10.5194/bg-11-5749-2014.
- OLSEN, A., TRIÑANES, J. A. et WANNINKHOF, R. (2004). Sea-air flux of CO₂ in the Caribbean Sea estimated using in situ and remote sensing data. *Remote Sensing of Environment*, 89(3): 309–325. doi : 10.1016/j.rse.2003.10.011.
- ORR, J. C., FABRY, V. J., AUMONT, O., BOPP, L., DONEY, S. C., FEELY, R. A., GNANADESIKAN, A., GRUBER, N., ISHIDA, A., JOOS, F., KEY, R. M., LINDSAY, K., MAIER-REIMER, E., MATEAR, R., MONFRAY, P., MOUCHET, A., NAJJAR, R. G., PLATTNER, G.-K., RODGERS, K. B., SABINE, C. L., SARMIENTO, J. L., SCHLITZER, R., SLATER, R. D., TOTTERDELL, I. J., WEIRIG, M.-F., YAMANAKA, Y. et YOOL, A. (2005). Anthropogenic ocean acidification over the twenty-first century and its impact on calcifying organisms. *Nature*, 437(7059):681–686. doi : 10.1038/nature04095.
- ORSI, A. H., WHITWORTH III, T. et NOWLIN JR., W. D. (1995). On the meridional extent and fronts of the Antarctic Circumpolar Current. *Deep Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 42(5):641–673. doi : 10.1016/0967-0637(95)00021-W.
- OYSTER, F. (2014). Water mass bodies of the Southern Ocean. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Antarctic_bottom_water.svg.
- PARK, Y.-H. et GAMBÉRONI, L. (1995). Large-scale circulation and its variability in the south Indian Ocean from TOPEX/POSEIDON altimetry. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 100(C12):24911–24929. doi : 10.1029/95JC01962.
- PHILIPPE BESSE (2003). *Pratique de la modélisation statistique*. Université Paul Sabatier, laboratoire de statistique et probabilités umr cnrs c5583 édition. <http://www.math.univ-toulouse.fr/~besse/enseignement.html>.
- POLIDORI, L. (2001). Introduction à la télédétection spatiale. Cours de télédétection, Ecole Supérieure des Géomètres et Topographes.
- RAHMSTORF, S. (2002). Ocean circulation and climate during the past 120,000 years. *Nature*, 419(6903):207–214. doi : 10.1038/nature01090.

- RÖDENBECK, C., KEELING, R. F., BAKKER, D. C. E., METZL, N., OLSEN, A., SABINE, C. et HEIMANN, M. (2013). Global surface-ocean CO₂ and sea-air CO₂ flux variability from an observation-driven ocean mixed-layer scheme. *Ocean Science*, 9(2):193–216. doi : 10.5194/os-9-193-2013.
- RINTOUL, S. R. (2008). The role of Southern Ocean in past, present and future climate : A strategy for the International Polar Year. *indian journal of marine science*, 37(4):373–385. ISSN : 0379-5136.
- RINTOUL, S. R., DONGUY, J. R. et ROEMMICH, D. H. (1997). Seasonal evolution of upper ocean thermal structure between Tasmania and Antarctica. *Deep Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 44(7):1185–1202. doi : 10.1016/S0967-0637(96)00125-2.
- SABINE, C. L., FEELY, R. A., GRUBER, N., KEY, R. M., LEE, K., BULLISTER, J. L., WANNINKHOF, R., WONG, C. S., WALLACE, D. W. R., TILBROOK, B., MILLERO, F. J., PENG, T.-H., KOZYR, A., ONO, T. et RIOS, A. F. (2004). The Oceanic Sink for Anthropogenic CO₂. *Science*, 305(5682):367–371. doi : 10.1126/science.1097403.
- SARMIENTO, J. L., GLOOR, M., GRUBER, N., BEAULIEU, C., JACOBSON, A. R., MIKALOFF FLETCHER, S. E., PACALA, S. et RODGERS, K. (2010). Trends and regional distributions of land and ocean carbon sinks. *Biogeosciences*, 7(8):2351–2367. doi : 10.5194/bg-7-2351-2010.
- SARMIENTO, J. L. et GRUBER, N. (2002). Sinks for anthropogenic carbon. *Physics Today*, 55(8):30–36. doi : 10.1063/1.1510279.
- SOKOLOV, S. et RINTOUL, S. R. (2002). Structure of Southern Ocean fronts at 140°E. *Journal of Marine Systems*, 37(1–3):151–184. doi : 10.1016/S0924-7963(02)00200-2.
- STEPHENS, M. P., SAMUELS, G., OLSON, D. B., FINE, R. A. et TAKAHASHI, T. (1995). Sea-air flux of CO₂ in the North Pacific using shipboard and satellite data. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 100(C7):13571–13583. doi : 10.1029/95JC00901.
- SWEENEY, C., GLOOR, E., JACOBSON, A. R., KEY, R. M., MCKINLEY, G., SARMIENTO, J. L. et WANNINKHOF, R. (2007). Constraining global air-sea gas exchange for CO₂ with recent bomb ¹⁴C measurements. *Global Biogeochemical Cycles*, 21(2):GB2015. doi : 10.1029/2006GB002784.
- TAKAHASHI, T., SUTHERLAND, S. C., SWEENEY, C., POISSON, A., METZL, N., TILBROOK, B., BATES, N., WANNINKHOF, R., FEELY, R. A., SABINE, C. et OTHERS (2002). Global sea-air CO₂ flux based on climatological surface ocean pCO₂, and seasonal biological and temperature effects. *Deep Sea Research Part II : Topical Studies in Oceanography*, 49(9):1601–1622. doi : 10.1016/S0967-0645(02)00003-6.
- TAMURA, S. et TATEISHI, M. (1997). Capabilities of a four-layered feedforward neural network : four layers versus three. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 8(2):251–255. doi : 10.1109/72.557662.
- THOMAS, H., FRIEDERIKE PROWE, A. E., LIMA, I. D., DONEY, S. C., WANNINKHOF, R., GREATBATCH, R. J., SCHUSTER, U. et CORBIÈRE, A. (2008). Changes in the North Atlantic Oscillation influence CO₂ uptake in the North Atlantic over the past 2 decades. *Global Biogeochemical Cycles*, 22(4):GB4027. doi : 10.1029/2007GB003167.

- TILBROOK, B., NEILL, C. et AKL., J. (2013). Integrated Marine Observing System (IMOS) sea surface and atmospheric fCO₂ measurements in the Southern Ocean onboard MV L'As-trolabe in 2013. *Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee*. Bases de données : 10.3334/CDIAC/OTG.VOS_AL_2008_2010 - 10.3334/CDIAC/OTG.VOS_AL_2011 - 10.3334/CDIAC/OTG.VOS_AL_2012 - 10.3334/CDIAC/OTG.VOS_AL_2013.
- TROUPIN, C., BARTH, A., SIRJACOBS, D., OUBERDOUS, M., BRANKART, J. M., BRASSEUR, P., RIXEN, M., ALVERA-AZCÁRATE, A., BELOUNIS, M., CAPET, A., LENARTZ, F., TOUSSAINT, M. E. et BECKERS, J. M. (2012). Generation of analysis and consistent error fields using the Data Interpolating Variational Analysis (DIVA). *Ocean Modelling*, 52–53:90–101. doi : 10.1016/j.ocemod.2012.05.002.
- WANNINKHOF, R. (1992). Relationship between wind speed and gas exchange. *J. geophys. Res*, 97(25):7373–7382. doi : 10.1029/92JC00188.
- WANNINKHOF, R. (2014). Relationship between wind speed and gas exchange over the ocean revisited : Gas exchange and wind speed over the ocean. *Limnology and Oceanography : Methods*, 12(6):351–362. doi : 10.4319/lom.2014.12.351.
- WANNINKHOF, R., ASHER, W. E., HO, D. T., SWEENEY, C. et MCGILLIS, W. R. (2009). Advances in Quantifying Air-Sea Gas Exchange and Environmental Forcing*. *Annual Review of Marine Science*, 1(1):213–244. doi : 10.1146/annurev.marine.010908.163742.
- WANNINKHOF, R. et MCGILLIS, W. R. (1999). A cubic relationship between air-sea CO₂ exchange and wind speed. *Geophysical Research Letters*, 26(13):1889–1892. doi : 10.1029/1999GL900363.
- WANNINKHOF, R., PARK, G. H., TAKAHASHI, T., SWEENEY, C., FEELY, R., NOJIRI, Y., GRUBER, N., DONEY, S. C., MCKINLEY, G. A., LENTON, A., LE QUÉRÉ, C., HEINZE, C., SCHWINGER, J., GRAVEN, H. et KHATIWALA, S. (2013). Global ocean carbon uptake : magnitude, variability and trends. *Biogeosciences*, 10(3):1983–2000. doi : 10.5194/bg-10-1983-2013.
- WEISS (1974). Carbon dioxide in water and seawater : the solubility of a non-ideal gas. *Marine Chemistry*, 2:203–215. doi : 10.1016/0304-4203(74)90015-2.
- WOOLF, D. K., LAND, P. E., SHUTLER, J. D., GODDIJN-MURPHY, L. M. et DONLON, C. J. (2016). On the calculation of air-sea fluxes of CO₂ in the presence of temperature and salinity gradients. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 121(2):1229–1248. doi : 10.1002/2015JC011427.
- YANG, J., GONG, P., FU, R., ZHANG, M., CHEN, J., LIANG, S., XU, B., SHI, J. et DICKINSON, R. (2013). The role of satellite remote sensing in climate change studies. *Nature Climate Change*, 3(10):875–883. doi : 10.1038/nclimate1908.
- ZEEBE, R. E. et WOLF-GLADROW, D. A. (2001). *CO₂ in Seawater : Equilibrium, Kinetics, Isotopes*. Gulf Professional Publishing. ISBN : 978-0444505798.

Annexe A

CONTRIBUTIONS SCIENTIFIQUES

A.1 Articles en auteur principal

A.1.1 Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean

- **Journal** : Antarctic Science, Cambridge Journals.
- **Date de publication** : 01 Décembre 2015.
- **DOI** : 10.1017/S0954102015000516.
- **Résumé** : L'objectif du projet MINERVE (Mesures à l'INterface Eau-Air de la Variabilité des Échanges de CO₂) est d'observer et de comprendre la variabilité saisonnière et interannuelle de la pression partielle de CO₂ ($p\text{CO}_2$) dans les eaux de surface en utilisant des données hydrologiques et biogéochimiques dans l'océan Austral, au sud de l'Australie. Itinéraires logistiques de la RV Astrolabe donnent accès à des zones peu étudiées, nous permettant ainsi de comprendre les différents processus agissant dans cette zone de l'océan Antarctique. La surface couverte par ces croisières, cependant, est minuscule par rapport à la surface totale de l'océan Antarctique. Les corrélations entre les données de température et de salinité de surface *in situ* ont été appliquées à des images satellites de la température de surface de la mer pour cartographier la salinité de surface de l'océan sur une zone beaucoup plus large que dans les pistes de croisière. Les comparaisons avec les données de salinité à partir de satellites qui fournissent une résolution de 100 km et 0,1 de précision indiquent que nous sommes en mesure de cartographier la salinité à 4 km de résolution et presque la même précision de $\pm 0,1$.
- **Citation** : M.A. Benallal, H. Moussa, F. Touratier, C. Goyet and A. Poisson (2016). Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean. Antarctic Science, 28, pp 127-134. doi:10.1017/S0954102015000516.

Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean

M.A. BENALLAL^{1,2} H. MOUSSA^{1,2} F. TOURATIER^{1,2} C. GOYET^{1,2}
A. POISSON^{1,3}

Antarctic Science (final draft post-refereeing)
DOI:<http://dx.doi.org/10.1017/S0954102015000516>

¹IMAGES ESPACE-DEV, Université de Perpignan Via Domitia, 52 Avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan Cedex 9, France.

²ESPACE-DEV, UG UA UR UM IRD, Maison de la télédétection, 500 Rue Jean-François Breton, 34093 Montpellier Cedex 5, France.

³Laboratoire d'Océanographie et du Climat: Expérimentation et Approches Numériques (LOCEAN/IPSL), Université Pierre et Marie Curie, Paris, France.

Mohamed.benallal@univ-perp.fr

Abstract

The aim of the MINERVE project (Mesures à l'INterface Eau-aiR de la Variabilité des Échanges de CO₂) is to observe and understand the seasonal and inter-annual variability of the partial pressure of CO₂ (pCO₂) in surface waters using hydrological and biogeochemical data in the Southern Ocean south of Australia. Logistics routes of the R/V Astrolabe provide access to scarcely studied areas, thus allowing us to understand the different processes acting in this area of the Antarctic Ocean. The surface area covered by these cruises, however, is tiny compared with the total surface area of the Antarctic Ocean. We apply correlations between in situ surface temperature and salinity data to satellite images of sea surface temperature to map ocean surface salinity over a much wider area than under the cruise tracks. Comparing with salinity given by satellites which provide 100 km resolution and 0.1 accuracy, we are able to map salinity at 4 km resolution and almost the same accuracy of ± 0.1 .

Received 21 October 2014, accepted 23 September 2015

Key words: mapping, Southern Ocean, surface salinity, temperature fields.

1 Introduction

The Southern Ocean plays a significant role in the exchange of CO₂ between the global atmosphere and ocean (Lenton et al., 2013). The MINERVE project (Mesures à l'INterface Eau-aiR de la Variabilité des Échanges de CO₂) was designed to observe and understand the seasonal and interannual variability of the partial pressure of CO₂ (pCO₂) in surface waters in the Southern Ocean south of Australia. The logistics routes of the RV Astrolabe between Hobart, Tasmania and the French Antarctic station at Dumont d'Urville provide an opportunity to collect hydrological and biogeochemical data in this remote area. However, the surface area sampled during these cruises is tiny compared with the surface area of the entire region of interest. Therefore, we seek ways to extrapolate the in situ data to a broader area using satellite images.

The exchange of CO₂ between the ocean and atmosphere is affected by both sea surface temperature (SST) and the stability of the surface mixed layer. The SST is routinely monitored by satellites. However, in cold high-latitude oceans, surface mixed layer stability is often controlled by salinity, which has only recently been mapped by satellite even though sea surface salin-

ity (SSS) is one of the fundamental variables for which sustained global observations are required to improve our knowledge and prediction of the ocean circulation, global water cycle and climate (Lagerloef et al., 2010). Two satellite missions now provide estimates of SSS.

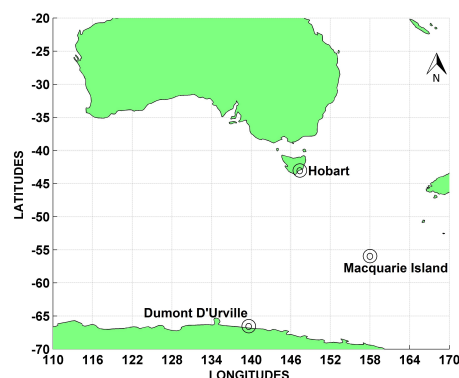


Figure 1: Regional map showing Hobart, Dumont D'Urville and Macquarie Island. Source: Google Earth.

The Aquarius satellite, a collaboration between NASA and the Space Agency of Argentina, was launched in June 2011 and operated until June 2015. Aquarius provided global maps of salinity with accuracy of ± 0.2 and a spatial resolution of 150 km (Le Vine et al., 2007). Data are available from <http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/Aquarius/>. The Soil Moisture and Ocean Salinity (SMOS) satellite was launched in November 2009 and continues to operate, providing maps of salinity with an accuracy of ± 0.1 and a spatial resolution of 50–100 km (Michel, 2006). Data

are available from <http://cp34-bec.cmima.csic.es/data/data-access/>.

In this paper, we report *in situ* measurements of the interannual variability of SSS in the southern Indian Ocean during the early spring of each year between 2002 and 2009. We then describe a technique for mapping SSS in the same period of the year, but from 2010–12 using satellite-based maps of SST. The technique is then assessed by comparisons between the *in situ* data and mapped values, and with direct SSS estimates from the two salinity satellites.

Part	Year	From Hobart to Dumont D'Urville				From Dumont D'Urville to Hobart				D.N.
		Start date	End date	Lowest L.	Highest L.	Start date	End date	Highest L.	Lowest L.	
1	2002	16/10	21/10	-43.96	-63.62	30/10	03/11	-61.81	-43.11	294
	2003	21/10	26/10	-45.14	-62.82	06/11	11/11	-62.15	-43.66	388
	2004	19/10	23/10	-43.47	-61.96	04/11	09/11	-62.14	-43.29	421
	2005	18/10	22/10	-44.92	-61.88	03/11	08/11	-62.82	-43.26	470
	2006	20/10	29/10	-43.64	-66.56	03/11	12/11	-66.66	-43.45	201
	2007	28/10	01/11	-43.20	-63.44	16/11	20/11	-63.42	-44.28	348
	2008	21/10	26/10	-42.84	-61.17	02/11	11/11	-65.84	-43.36	4410
	2009	22/10	25/10	-48.58	-62.05	11/11	16/11	-62.47	-43.47	7671
	2	2010	21/10	27/10	-42.88	-63.53	31/10	07/11	-63.28	-43.51
2011		25/10	26/10	-54.59	-57.97	06/12	10/12	-63.46	-43.31	4181
2012		23/10	28/10	-42.84	-62.83	18/11	22/11	-61.70	-42.94	6169

Table 1: Details of the MINERVE database. Part 1 was used to establish the model. Part 2 was used to validate the model. L. = Latitude, D.N. = Data numbers

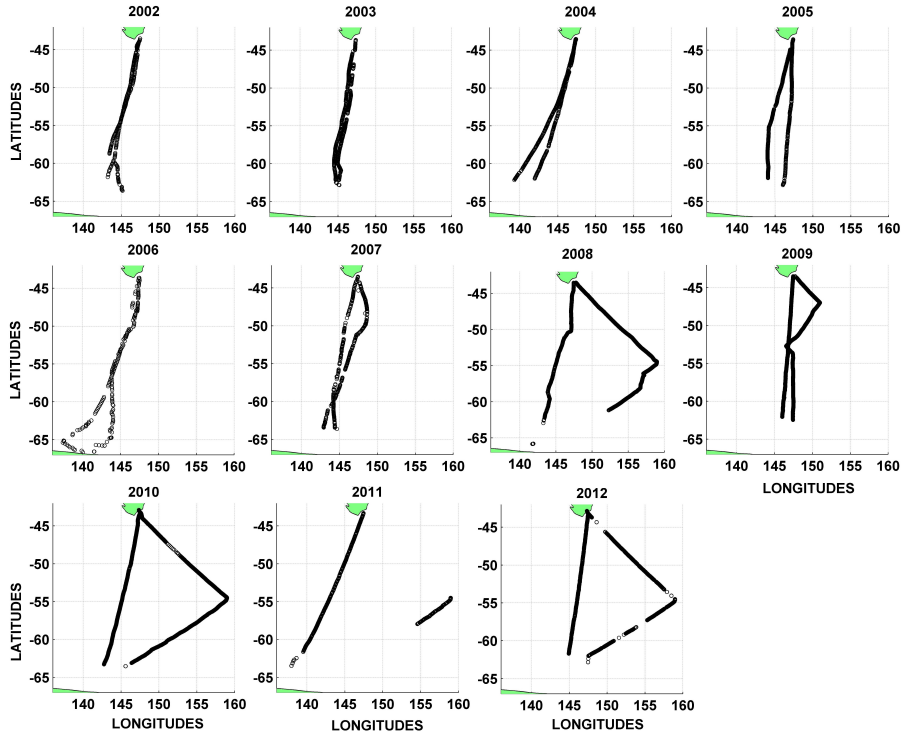


Figure 2: Cruise tracks of the MINERVE project where data are during the first cruise every year.

2 methods

Cruise details

The database from the MINERVE project was utilized for this study. The database was divided into two parts: one to build a model (2002–09) and the second (2010–12) to provide a validation test. There are 14 203 *in situ* data points available to establish the model and 21 395 *in situ* data points for the validation process. The MINERVE project acquired data during three cruises each summer from October to March, between Hobart (Tasmania, Australia, $\sim 43^\circ\text{S}$) and Dumont D’Urville (Adélie Land, Antarctica, $\sim 67^\circ\text{S}$) (Fig. 1). Only data from early summer is considered here, mainly in October and November; see Table 1 for dates and latitudes of each cruise used to establish (part 1) and validate (part 2) the model. The cruise tracks (Fig. 2) every year cross all latitudes between

Tasmania and Antarctica, although the presence of ice in the early summer prevents data collection south of $\sim 63^\circ\text{S}$. Changes of longitude are primarily due to weather conditions; however, in some years (2008, 2010, 2011 and 2012), the ship had to go to Macquarie Island (55°S , 158°E) (Fig. 1).

Data and model

The MINERVE project provides data on surface water parameters from southern Australia to the sea ice edge north of Antarctica. The latitudinal distribution of SST and SSS (Fig. 3) shows cooling and freshening from roughly SST = 2°C and SSS = 35.1 near Hobart to $\sim -1.9^\circ\text{C}$ (the freezing point) and 33.9 near 63°S . There is a substantial range in both SST and SSS at each latitude, associated with both the differences in cruise tracks (Fig. 2) and interannual variability.

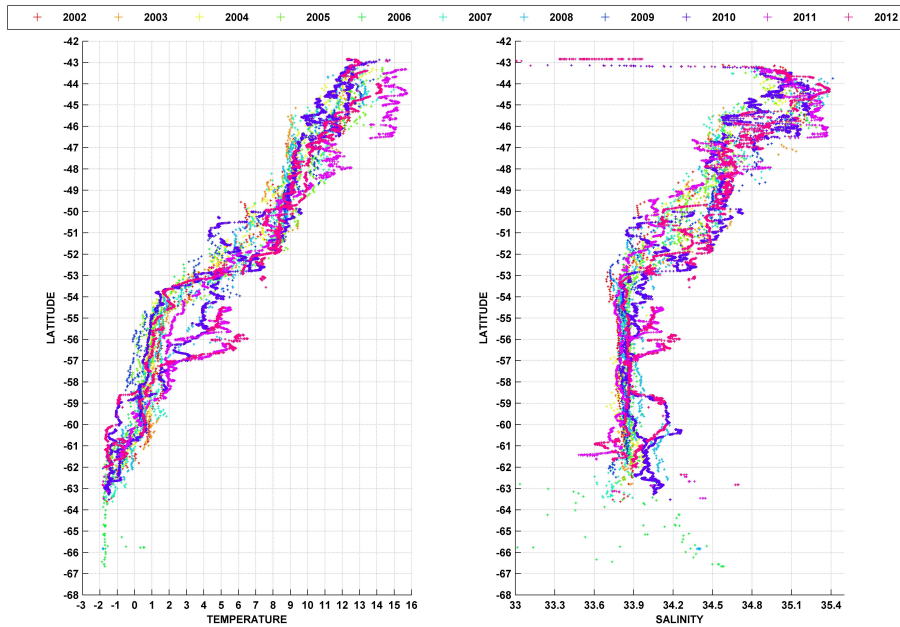


Figure 3: Latitudinal distribution of temperature and salinity in the Southern Ocean south of Australia during the 2002–12 MINERVE project.

The surface fitting toolbox of MATLABM was used to develop a model based on the MINERVE database of SST, SSS and latitude, φ . This toolbox performs multiple linear regressions between these three variables. This method provides good results for our purpose (Moussa et al., 2015). We carried out the analysis for Part 1 of the database (2002–09), setting the degree of φ at 1 and the degree of SST at 2, resulting in the following function:

$$SSS_{mod} = a + b \times \varphi + c \times SST + d \times Lat \times SST + e \times SST^2 \quad (1)$$

where the optimized values of coefficients were $a = 33.10000$, $b = -0.01257$, $c = 0.103600$, $d = 0.001929$ and $e = 0.008504$. The fitting surface and the residual plot are shown in Fig. 4.

Three statistical measures were calculated to evaluate the model. Model error at each point in parameter space is defined as $e_i = P_i - O_i$ where e_i is the error, P_i ($i = 1..n$) is the model-predicted value and O_i ($i = 1..n$) is the observed value. The root-mean-square error (RMSE; Willmott and Matsuura (2005)) is defined as:

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

The mean absolute error (MAE) is based on the absolute value of each error estimate (Willmott and Matsuura, 2005), i.e.

$$MAE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |e_i| \right] \quad (3)$$

The mean bias error (MBE) is the simple average of individual error estimates:

$$MBE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i \right] \quad (4)$$

The MBE indicates whether the average estimate is less than or greater than the observed values. The following measures were obtained for the modelled error in salinity: $MBE = -3.01 \times 10^{-14}$, $MAE = 0.0706$, and $RMSE = 0.0958$. The values for MBE and RMSE indicate that the model, in general, has a salinity accuracy that is comparable with satellite-derived SSS accuracy. However, some large values of e_i are found in the far southern portion of the domain (Fig. 4b).

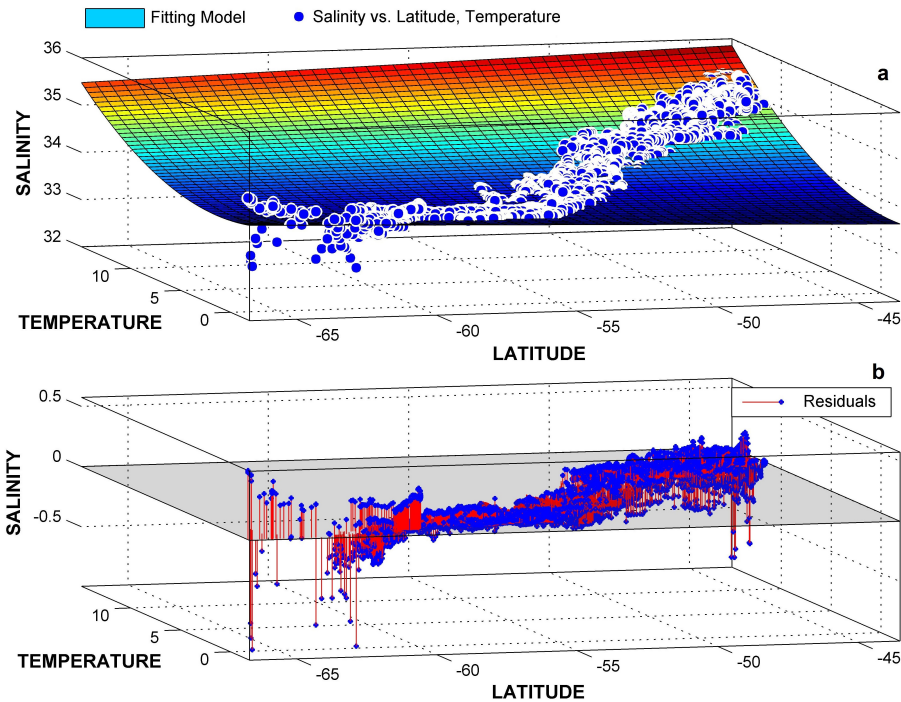


Figure 4: Model suggested by the surface fitting toolbox. a. Dataset points and fitting surface. b. Residuals plot.

3 Results

Satellite-derived maps of SST were obtained from Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer (MODIS) on the NASA Aqua satellite. Data are provided as daily averages with a spatial resolution of 4×4 km (<http://oceancolor.gsfc.nasa.gov>). For comparison with the MINERVE database, MODIS SST points corresponding as closely as possible in space and time to our *in situ* datapoints were selected. Our statistical fit model (Eq. 1) was then applied to the satellite-derived SST and latitude φ to estimate SSS, and compare these values with *in situ* SSS data for part 2 data (2010–12) that were not included in the development of the model fit. The loss of satellite-derived SST data due to weather substantially reduces the number

of points for comparison, from 21 395 to 4672 points. There is a mismatch between satellite and *in situ* SST around 48°S and 51°S (Fig. 5a). These errors are probably due to the calibration of the satellite instruments, which is rather complex. At the moment, there are four main calibration methodologies. The aim of these methodologies is to have a good accuracy over the globe; however, calibration can cause significant errors when satellite data are compared with specific local *in situ* data. Note that these errors appear in two fronts (explained in the following paragraph) which increase the difficulty for modelling for the satellite algorithms.

The errors as functions of latitude (Fig. 5) are usually small but with some regions of large outliers. The study area was divided into three regions (Laika et al.,

2009) representing five different hydrographic zones of the Southern Ocean (Rintoul et al., 1997):

1. The Sub-Antarctic Region (SAR) which it is composed of three zones:
 - The Sub-Tropical Zone (STZ) from -43.5°S to -47.5°S .
 - The Sub-Antarctic Zone (SAZ) from -47.5°S to -51.5°S .
 - The Polar Frontal Zone (PFZ) from -51.5°S to -54.5°S .
2. The Permanent Open Ocean Zone (POOZ) from -54.5°S to -60°S .
3. The Seasonal Ice Zone (SIZ) from -60.5°S to -65°S .

Table 2 shows all residuals by zone and for the whole study area. Model errors are larger in the SAZ and STZ than in the other zones. However, the error in the estimation of salinity is correlated with the difference between the *in situ* and the satellite temperature (Fig. 5a). That is, the large errors in SSS for some latitude ranges are caused by errors in satellite-derived temperature rather than in our regression model (Eq. 1).

There is large mean bias between satellite and *in situ* temperature (Fig 5a), with MBE = -0.6952 (Table 2). When outliers are removed, keeping only points where residuals are between $+1$ and -1.5 , the new MBE is -0.2974 . This bias is applied to satellite temperature data so that the MBE becomes zero. After testing the model, new residuals for salinity and temperature are smaller; compare Fig. 6 with Fig. 5, and Table 3 with Table 2.

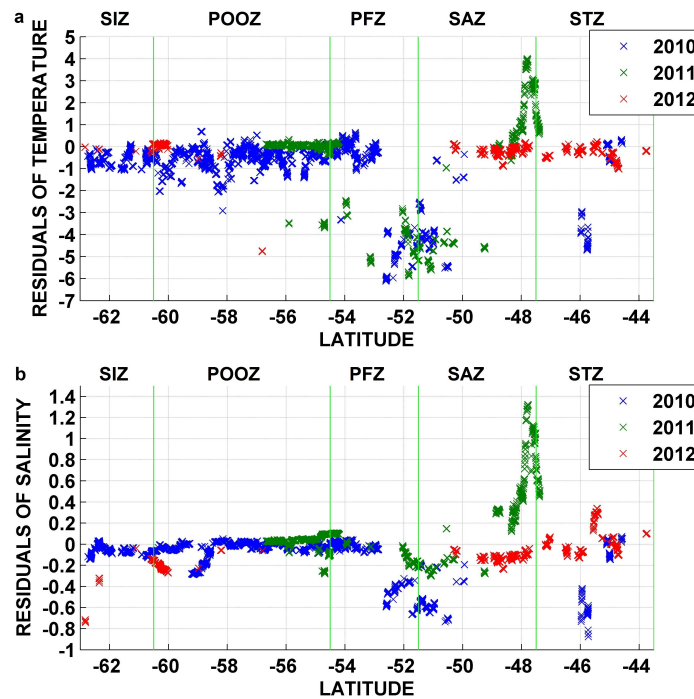


Figure 5: Salinity and temperature residuals (satellite to *in situ* data comparison). Residuals between a. satellite and observed temperature, and b. estimated and observed salinity.

Area	Numbers	Estimated salinity vs <i>in situ</i> salinity			Satellite temperature vs <i>in situ</i> temperature		
		MBE	MAE	RMSE	MBE	MAE	RMSE
STZ	354	0.0001	0.1763	0.2776	-0.4812	0.6958	1.3225
SAZ	678	-0.0223	0.3183	0.4296	-1.0521	1.7228	2.5537
PFZ	614	-0.1092	0.1387	0.2270	-1.7291	1.8288	2.7897
POOZ	2505	-0.0383	0.0577	0.0881	-0.4094	0.4611	0.6962
SIZ	521	-0.0758	0.0781	0.1102	-0.5322	0.5390	0.6064
Whole area	4672	-0.0466	0.1174	0.2119	-0.6952	0.8504	1.5500

Table 2: Model testing results (2010–12). MAE = mean absolute error, MBE = mean bias error, PFZ = Polar Frontal Zone, POOZ = Permanent Open Ocean Zone, RMSE = root-mean-square error, SAR = Sub-Antarctic Region, SAZ = Sub-Antarctic Zone, SIZ = Seasonal Ice Zone, STZ = Sub-Tropical Zone.

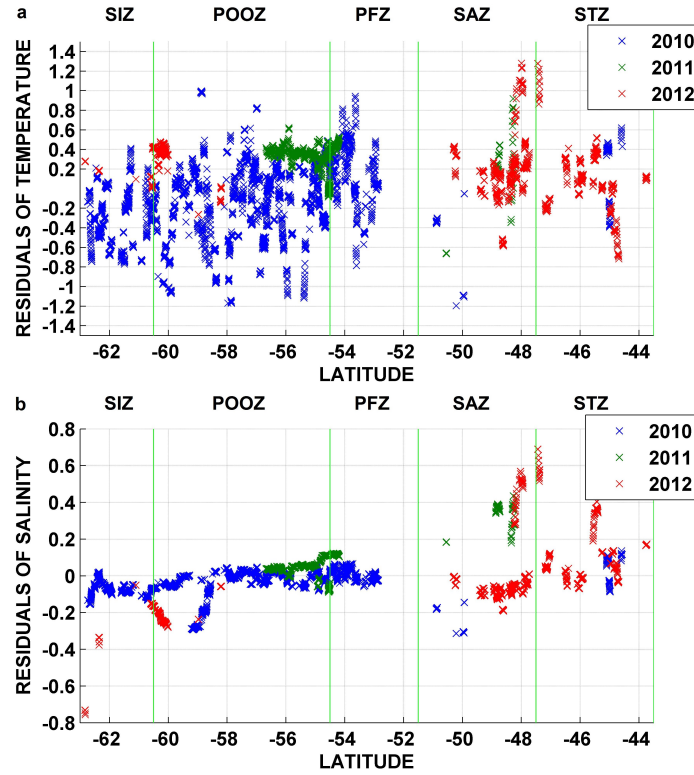


Figure 6: Salinity and temperature residuals after selecting process. Residuals between a. satellite and observed temperature, and b. estimated and observed salinity.

Area	Numbers	Estimated salinity vs <i>in situ</i> salinity			Satellite temperature vs <i>in situ</i> temperature		
		MBE	MAE	RMSE	MBE	MAE	RMSE
STZ	305	0.0969	0.1193	0.1805	0.1089	0.2923	0.3701
SAZ	401	0.0200	0.1480	0.2023	0.1457	0.2901	0.4001
PFZ	381	0.0268	0.0435	0.0567	0.2168	0.3197	0.3745
POOZ	2376	-0.0314	0.0578	0.0890	0.0218	0.3077	0.3837
SIZ	521	-0.0863	0.0872	0.1187	0.2348	0.3054	0.3735
Whole area	3984	-0.0180	0.0741	0.1160	0	0.3058	0.3822

Table 3: Model testing results after the selection process. L = Latitude. MAE =mean absolute error, MBE =mean bias error, PFZ =Polar Frontal Zone, POOZ =Permanent Open Ocean Zone, RMSE =root-mean-square error, SAR =Sub-Antarctic Region, SAZ =Sub-Antarctic Zone, SIZ =Seasonal Ice Zone, STZ =Sub-Tropical Zone.

4 Discussion

Satellite SST maps are available every day (with more or less points provided depending on the climatic conditions), at 4 km spatial resolution. The model we have established (Eq. 1) allows us to map SSS at the same resolution in the early summer in the Southern Ocean south of Australia.

This spatial resolution is much finer than we can obtain from existing satellite salinity sensors on the Aquarius and SMOS satellites (~ 150 km and 50–100 km, respectively). The daily sampling of SST by satellites is much more frequent than either salinity satellite provides. The accuracy of our model, in salinity units (RMSE = 0.116 for the entire region from 43oS to the ice edge near 63oS), is comparable to the cited accuracy of the satellite-derived values; therefore, our model may provide valuable information on SSS for temporal and

spatial scales that cannot be resolved by the satellite-based salinity records. An additional source of error, when modelling SSS based on satellite-derived SST, is that the RMSE for satellite vs *in situ* SST is $\sim 0.38^\circ\text{C}$ (Table 3); based on Eq. (1), this converts to ~ 0.1 in SSS.

As an example of the potential value of our model, Fig. 7 compares a one day modelled SSS (Eq. (1) applied to satellite-derived SST data) with coarser estimates from SMOS and Aquarius. The differences between resolutions are clear. Note that SMOS data are provided as an average of at a minimum of three days. Table 4 shows a pairwise comparison of modelled SSS with SMOS data and with Aquarius data using *in situ* data from 2011 to 2012 (Table I, part 2). The RMSE of our modelled SSS is much smaller than both SMOS and Aquarius data.

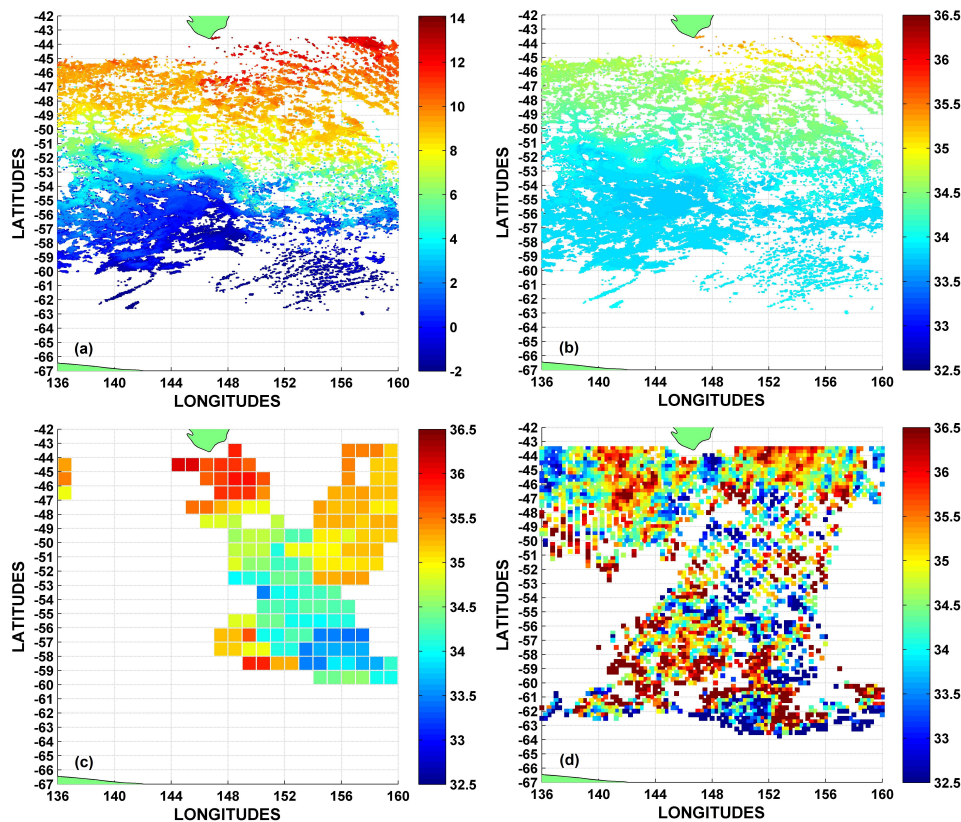


Figure 7: Comparison of modelled sea surface salinity (SSS) using sea surface temperature (SST) with SMOS and Aquarius satellite data. a. Satellite SST in the Antarctic Ocean south of Australia on 25 October 2011. b. Modelled estimated salinity from a. c. Aquarius satellite image from 25 October 2011. d. SMOS three-day average satellite image from 25 October 2011 to 27 October 2011.

	Modelled SSS vs SMOS data	Modelled SSS vs Aquarius data
Numbers	1083	696
RMSE of modelled SSS	0.1841	0.0755
RMSE of corresponding satellite data	1.9781	0.4989

Table 4: Comparison between modelled sea surface salinity (SSS) and two satellite products (SMOS and Aquarius). RMSE = root-mean-square error.

5 Conclusions

We have demonstrated the value of developing algorithms to relate SSS to satellite-derived SST, by providing the ability to map SSS at much finer spatial and temporal scales that can be resolved by existing salinity satellites, Aquarius (stopped on 17 June 2015) and SMOS. Furthermore, as these satellites have only been operating for a few years, the algorithm allows the extension of maps of SSS into time ranges for which no satellite maps of SSS are available. This approach can be further developed to determine SSS throughout the year, and to contribute to a broader range of applications including determination of surface density, air-sea exchanges, and estimation and analysis of air-sea CO₂ fluxes.

Collecting more in situ data is the best way to improve our models; therefore, it is important that the MINERVE project remains active.

6 Acknowledgements

I would like to express my very great appreciation to all the persons who built and continue to provide accurate databases for the MINERVE project, and the IPEV (Institut polaire français Paul Émile Victor) which provides the logistics framework, human resources, and technical and financial resources to the development of French research in the Polar Regions. I would like to thank NASA for providing satellite temperature images. I am particularly grateful for the MESRS (Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique) from Algeria which funded my PhD and gave me the opportunity to undertake research at the IMAGES laboratory. We are also grateful to the reviewers for their comments on the manuscript.

7 Authors contributions

Mrs H. Moussa was involved in the conception and writing of the programs for the study. Dr F. Touratier supervised this PhD research and assisted with writing and revising this paper. Professor C. Goyet assisted with analysis of the data and provided ideas for the selection process which enabled the achievement of better results, and also participated in revising the article. Professor A. Poisson participated on the MINERVE project where we found our data, and also assisted with revising the article.

References

- Lagerloef, G., Boutin, J., Chao, Y., Delcroix, T., Font, J., Niiler, P., Reul, N., Riser, S. J., Schmitt, R., Stammer, D., and others (2010). Resolving the global surface salinity field and variations by blending satellite and in situ observations. In *OceanObs 09*, pages 587–597. European Space Agency.
- Laika, H., Goyet, C., Vouve, F., Poisson, A., and Touratier, F. (2009). Interannual properties of the CO₂ system in the Southern Ocean south of Australia. *Antarctic Science*, 21(06):663.
- Le Vine, D., Lagerloef, G., Colomb, F., Yueh, S., and Pellerano, F. (2007). Aquarius: An Instrument to Monitor Sea Surface Salinity From Space. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 45(7):2040–2050.
- Lenton, A., Tilbrook, B., Law, R. M., Bakker, D., Doney, S. C., Gruber, N., Ishii, M., Hoppema, M., Lovenduski, N. S., Matear, R. J., McNeil, B. I., Metzl, N., Mikaloff Fletcher, S. E., Monteiro, P. M. S., Rödenbeck, C., Sweeney, C., and Takahashi, T. (2013). Sea-air CO₂ fluxes in the Southern Ocean for the period 1990–2009. *Biogeosciences*, 10(6):4037–4054.
- Michel, S. (2006). *Téledétection de la salinité à la surface des océans : variabilité de la salinité de surface d'après un modèle global de couche mélangée océanique*. Paris 7.
- Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., Lefevre, N., EL Jai, M. C., Guglielmi, V., and Touratier, F. (2015). A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data. *ESAIM: Proceedings and Surveys*, 49:65–77.
- Rintoul, S. R., Donguy, J. R., and Roemmich, D. H. (1997). Seasonal evolution of upper ocean thermal structure between Tasmania and Antarctica. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 44(7):1185–1202.
- Willmott, C. J. and Matsuura, K. (2005). Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *Climate research*, 30(1):79.

A.1.2 Satellite-derived CO₂ flux in the surface seawater of the austral ocean south of Australia

- **Journal** : International Journal of Remote Sensing
- **Date de publication** : En Préparation.
- **DOI** : En Préparation.
- **Résumé** : Un algorithme de calcul du flux air-mer de CO₂ (FCO₂) en utilisant les données satellitaires (*sat*) est développé et présenté dans cette étude. Les paramètres utilisés pour ce calcul sont : la température à la surface de l’océan (SST) et la Chlorophylle *a* du satellite MODIS_{Aqua}, la salinité (SSS) estimée par la SST de MODIS_{Aqua} en utilisant la régression linéaire multiple (RLM), la fugacité du CO₂ dans l’eau ($f\text{CO}_2^{\text{eau}}$) estimée par la SST et la Chl_a de MODIS_{Aqua} en utilisant les FeedForward neural networks (FNNs), le CO₂ atmosphérique de la station Cape Grim et la vitesse du vent des deux satellites ASQAT et QSCAT. Les données *in situ* récoltées sur le RV L’Astrolabe sont utilisées pour créer et valider les modèles. Ces derniers sont testés en utilisant les données *sat*. Cette étude se focalise sur le secteur australien de l’océan austral. Les résultats montrent une amélioration de l’estimation de SSS par *sat* avec une précision de ± 0.16 en utilisant la SST et la latitude, une bonne estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ d’une précision de $\pm 9.45 \mu\text{atm}$ et un calcul du FCO₂ avec une erreur de $\pm 3 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$. Dans la période du printemps à l’été austral, l’interpolation du FCO₂ montre que cette région devient de plus en plus un puits de CO₂ atmosphérique au fil des années (d’une moyenne générale de d’absorption d’environ $2 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2002/2003 à environ $7 \text{ mmol CO}_2 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$ en 2014/2015).
- **Citation** : M.A. Benallala, H. Moussaa, J.M. Lencina-Avila, F. Touratiera, C. Goyet, M.C. El Jai, N. Poissona, A. Poissona, (2016), Satellite-derived CO₂ flux in the surface seawater of the austral ocean south of Australia, In Press, International Journal of Remote Sensing.

Satellite-derived CO₂ flux in the surface seawater of the austral ocean south of Australia

M.A. BENALLAL^{1,2} H. MOUSSA^{1,2} J.M. Lencina-Avila^{1,2} F. TOURATIER^{1,2}
C. GOYET^{1,2} N. Poisson^{1,3} A. POISSON^{1,4}

International Journal of Remote Sensing (draft pre-refereeing)

¹IMAGES ESPACE-DEV, Université de Perpignan Via Domitia, 52 Avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan Cedex 9, France.

²ESPACE-DEV, UG UA UR UM IRD, Maison de la télédétection, 500 Rue Jean-François Breton, 34093 Montpellier Cedex 5, France.

³Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Énergie (ADEME), Paris, France.

⁴Laboratoire d'Océanographie et du Climat : Expérimentations et Approches Numériques (LOCEAN/IPSL), Université Pierre et Marie Curie, Paris, France.

Mohamed.benallal@univ-perp.fr

Abstract

A step by step algorithm for air-sea CO₂ flux ($F(\text{CO}_2)$) calculation from satellite parameters is presented in this study. Parameters used for $F(\text{CO}_2)$ calculation are : (1) sea surface temperature (SST) and chlorophyll-*a* (chl-*a*) from Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer Aqua (MODIS Aqua), (2) sea surface salinity (SSS) estimated from MODIS Aqua SST using multiple linear regression (MLR), (3) seawater CO₂ fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) estimated by MODIS Aqua SST and chl-*a* using feedforward neural networks (FNN), (4) atmospheric CO₂ fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$) from the Cape Grim station and (5) wind speed (WS) from the Quick and Advanced Scatterometer (QSCAT and ASCAT). *In situ* data provided by (1) the SURVOSTRAL (SURveillance de l'Océan AuSTRAL - Monitoring the Southern Ocean) project, (2) IMOS (The Integrated Marine Observed System) project and (3) MINERVE (Mesures à l'INterface Eau-aiR de la Variabilité des Échanges de CO₂) projet collected on the research vessel (RV) L'Astrolabe, are used to establish and validate the models. These models are then tested using remote sensing data. This work focus on the southern ocean from the south of Australia to the Antarctica coasts (between 43.5 °S and 67 °S), on the period of spring and austral summer (from October to March, between 2002/2003 and 2014/2015). In each step, the result's precision of experiments was determined by the Root Mean Square Error (RMSE). Results show (1) an improvement of satellite SSS estimation with a precision of ± 0.16 using SST and latitude, (2) an estimation of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ by satellite data with a good accuracy of ± 9.45 μatm (0.96 Pa) and (3) a calculation of $F(\text{CO}_2)$ using satellite data with a global RMSE of about ± 3 $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$. The interpolated $F(\text{CO}_2)$ shows that, in the period of austral spring and summer, this region absorbs the atmospheric CO₂, and becomes a stronger sink of CO₂ throughout the years (from an overall average absorption of about 2 $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2002/2003 to about 7 $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2014/2015).

Submitted 18 May 2016, In press.

Key words: Southern Ocean; CO₂ flux; MODIS Aqua; Multiple Linear Regression; Neural networks.

1 Introduction

It has long been recognized that the ocean represents a sink of carbon dioxide for the atmosphere. About 30–40% of the anthropogenic carbon released into the atmosphere is absorbed by world oceans (Brewer, 1978; Chen and Millero, 1979; Siegenthaler and Sarmiento, 1993; Feely et al., 2001; Sarmiento and Gruber, 2002; Takahashi et al., 2002; Sabine et al., 2004; Le Quéré et al., 2014, 2015). Human activities are the much responsible of this anthropogenic CO₂ increase. The atmospheric CO₂ fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$) has increased from 277 μatm in 1750 (Pre-industrial period) to 407 μatm in April 2016 (Dlugokencky and Tans, 2016; Le Quéré et al., 2015) (according to Bureau International Des Poids Et Mesures (1955), 1 atm = 101325

Pa). Understanding the present-day carbon budget is directly related to determining the role of the Southern Ocean. Sallée et al. (2012) reported that more than 40% of the anthropogenic CO₂ in the ocean has entered south of 40 °S. Yet an accurate and global estimation of the air-sea CO₂ flux ($F(\text{CO}_2)$) in this region, is crucial to study effects on climate change and especially on ocean acidification.

Until a few years ago, the estimation of $F(\text{CO}_2)$ has been obtained using ship board measurements data (*in situ* data). Even if these data are considered as references to provide models (due to their good precision), these data are limited in spatial and temporal coverage. Satellite data seems to be a good alternative since they have proved their worth in several previous

works on estimating seawater CO_2 fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) and $F(\text{CO}_2)$ over many areas of the ocean (Stephens et al., 1995; McNeil et al., 2007; Zhu et al., 2009; Moussa et al., 2016). The southern ocean, especially the Antarctic zone, is a very difficult area to access by oceanographic research vessels (RV) (far away from any coast, storms, strong winds, ice, ...). This causes a lack of *in situ* observations and a restriction for research cruises during the period from october to march (austral spring and summer). Satellites are more effective since they provide data every day of the year and throughout the seasons, moreover they cover much larger areas.

This work is based on databases from three projects; (1) the SURVOSTRAL project (SURveillance de l'Océan AuSTRAL - Monitoring the Southern Ocean), which aims to provide temperature and salinity informations in the upper ocean, in order to use these valuable data for monitoring climate variations and validating computer simulations and projections for the Southern ocean (<http://www.legos.obs-mip.fr/recherches/>

projets-en-cours/projet-survostral), (2) IMOS (The Integrated Marine Observed System), which is designed to be a fully-integrated national system, observing at ocean-basin and regional scales and covering physical, chemical and biological variables (<http://imos.aodn.org.au/>) and (3) MINERVE (Mesures à l'Interface Eau-air de la Variabilité des Échanges de CO_2 - measurements in the sea-air interface of the CO_2 exchange variability) projet which aims to observe and understand the seasonal and inter-annual variability of the partial pressure of CO_2 ($p(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) in surface waters using hydrological and bio-geo-chemical data in Antarctic Ocean South of Australia (<http://caraus.ipsl.jussieu.fr/>). These programs provide data of three cruises during each austral summer, between Hobart (Tasmania, Australia, 42.88 °S, 147.33 °E) and Dumont D'Urville (Terre Adelie, Antarctica, 66.40 °S, 140.00 °E) (Figure 1(a)). Cruises are conducted on board the RV L'Astrolabe, for which logistics routes are presented in Figure 1(b) (SURVOSTRAL data was used to plot these cruise tracks)

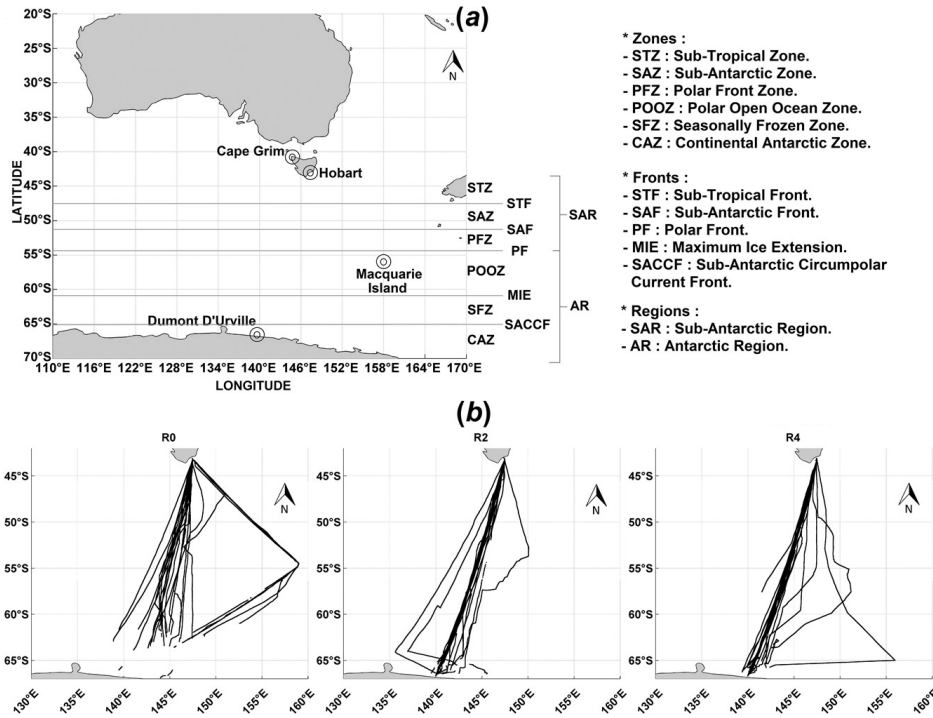


Figure 1: Regional map of the studied area : (a) southern ocean regions, zones and fronts. (b) cruise tracks of the RV L'Astrolabe (where data are available) (R0, R2 and R4 are the three rotations)

In this paper, we present a set of methods detailed in a general algorithm in Figure 2. We start by analyzing all required parameters, after that we establish models, map $F(\text{CO}_2)$, and finally we discuss the ob-

tained results. The three main steps of this algorithm are the following : (1) modelling and estimating sea surface salinity (SSS¹) ((i) and (ii) respectively in Figure 2), (2) modelling and estimating $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ ((iii)

¹According to IAPSO Working Group on Symbols, Units, and Nomenclature in Physical Oceanography. (1985), SSS has no unit.

and (iv) respectively in Figure 2) and (3) use all the resulting parameters to estimate $F(\text{CO}_2)$ and then, compare the resulting data with $F(\text{CO}_2)$ calculated using *in situ* parameters ((v) and (vi) respectively in Figure 2).

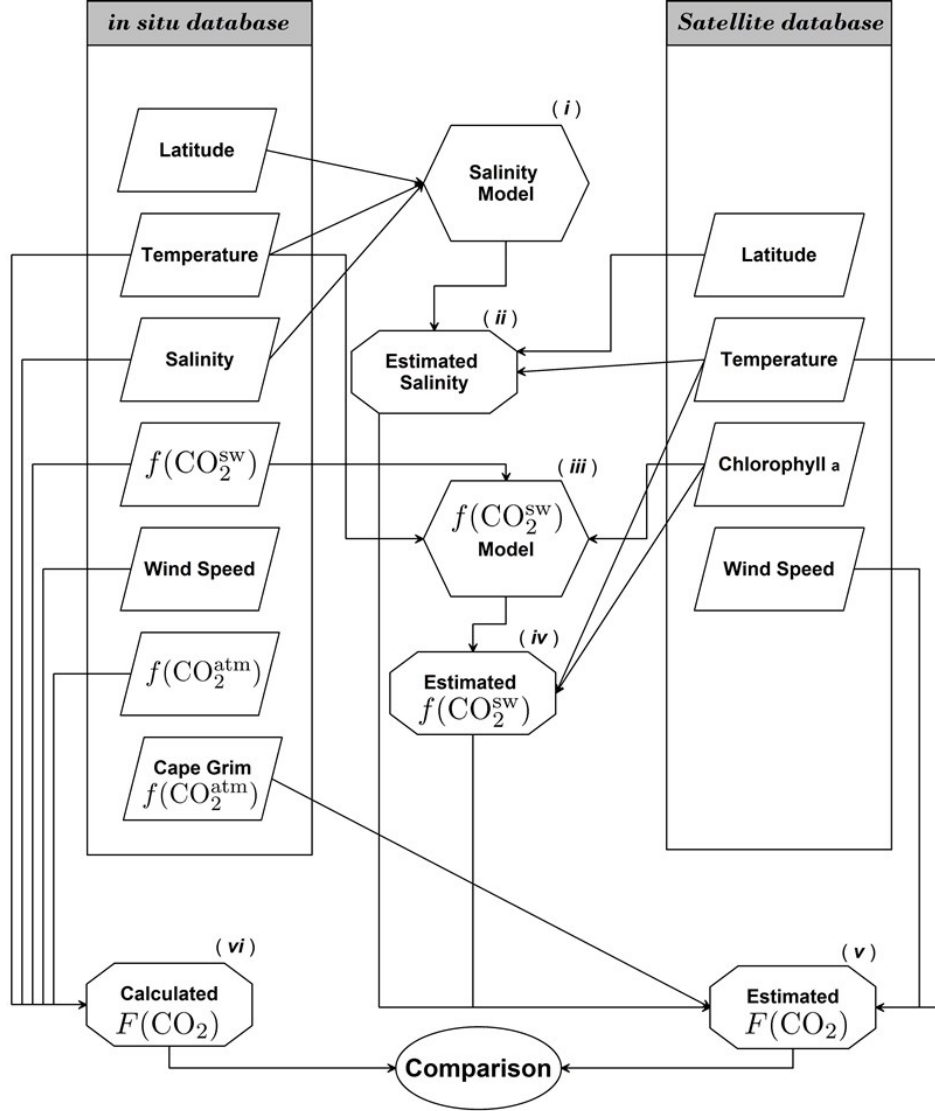


Figure 2: The general followed algorithm : (i) : SSS model construction using *in situ* data, (ii) : SSS estimation with satellite data, (iii) : $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ model construction using *in situ* data, (iv) : $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ estimation with satellite data, (v) : Calculate $F(\text{CO}_2)$ using satellite data and estimated parameters.

2 Data and Methods

The difference between $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ (expressed in μatm) indicates the rate of CO_2 exchange in the air-sea interface and its direction. This exchange is represented by the CO_2 flux ($F(\text{CO}_2)$, expressed in $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$) which can be computed as follows :

$$F(\text{CO}_2) = \beta_0 \times k \times (f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) - f(\text{CO}_2^{\text{atm}})) \quad (1)$$

wherein β_0 represents the solubility coefficient of CO_2 in seawater ($\text{mol l}^{-1} \text{ atm}^{-1}$), determined according to Weiss (1974) as a function of sea surface temperature (SST; expressed in $^\circ\text{C}$) and SSS. k represents the gas transfer velocity (cm h^{-1}), calculated as function of wind speed (WS; u expressed in m s^{-1}) and the Schmidt number Sc (no unit) of CO_2 in sea water. Positive $F(\text{CO}_2)$ value indicates oceanic source of CO_2 and negative value indicates an oceanic CO_2 sink, this

sign is determined by the term $f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) - f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ commonly noted as $\Delta f\text{CO}_2$. In order to calculate $F(\text{CO}_2)$, the following parameters are then required : SST, SSS, $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ and WS.

2.1 *In situ* data

All data collected for this study are presented in this section. *In situ* data used in this paper are available as follow :

- The SURVOSTRAL project provides data of SST and SSS from October 2002/March 2003 to October 2014/March 2015. Distribution and interannual variabilities of these two parameters was presented in Chaigneau and Morrow (2002), Morrow et al. (2008) and Morrow and Kestenare (2014).
- The IMOS program provides of SST, SSS, $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ and WS data from October 2008/March 2009 to October 2012/March 2013 (databases are available for download in http://cdiac.ornl.gov/ftp/oceans/VOS_L_Astrolobe) (Tilbrook et al., 2013).
- The MINERVE project provides data of SST, SSS and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ for some rotations (R0 for 2005/2006, R2 for 2004/2005 and 2006/2007, R4 for 2004/2005).

R0 rotations are done in the austral spring, R4 in the austral summer and R2 in the transition between these two seasons. For each rotation, a first model was developed to interpolate SSS (Section 2.4) and a second one for interpolating $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (Section 2.5).

In addition to this databases, data of $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ from the Cape Grim station (40.68 °S 144.68 °E, Figure 1(a)) was used for estimating $F(\text{CO}_2)$. The Cape Grim station is located just south of the isolated north-west tip of Tasmania (Figure 1(a)). The sampled air arrives at Cape Grim after long trajectories over the Southern ocean, under conditions described as "baseline". This baseline air is representative of a large area of the Southern hemisphere. Cape Grim is an important site because it is unaffected by regional pollution sources (there are no nearby cities or industry that would contaminate the air quality)(Cape Grim Greenhouse Gas Data, greenhouse-gases, <http://www.csiro.au/>).

2.2 Satellite data

2.2.1 MODIS Aqua

The Moderate Resolution Imaging Spectro-radiometer Aqua (MODIS Aqua), is a part of the Aqua Earth-Observing Satellite Mission (<http://aqua.nasa.gov/>) which is a part of the Earth Observing System (EOS)(<http://eosps.nasa.gov/>). The purpose of this major program is to provide the data collection on the water cycle of the earth, including evaporation from the oceans, water vapor in the atmosphere,

clouds, precipitation, soil moisture, sea ice, ice, earth and snow cover on the land and ice (NASA Goddard Space Flight Center, Ocean Ecology Laboratory, Ocean Biology Processing Group, 2014).

We used the Level 3 Standard Mapped Image (SMI) product of SST and chlorophyll-*a* (chl-*a*). These products are a 8640×4320 pixels images which correspond to a resolution of $4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$. All MODIS Aqua products are available at different time scales : one day image, 8-day composite image, one month, one season, and one year. Additional time scales are available for some periods.

2.2.2 QSCAT and ASCAT

QSCAT and ASCAT are diminutives of Quick and Advanced Scatterometer. The two satellites provide WS data near the ocean surface (about 10 m height). They are complementary in term of time; QSCAT was launched in June 1999 and operated until November 2009, and ASCAT was launched on the October 2006 and became fully operational since May 2007 (up until now).

Data provided by the two instruments are available for users in different time scales (one day, one week, one month, and one year) with a spatial resolution of $25 \text{ km} \times 25 \text{ km}$ which correspond to a 1440×720 pixels images (<http://www.remss.com/>).

2.3 Methods

2.3.1 Multiple Linear Regression (MLR)

The aim of the MLR method is to find coefficients ($\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$) to determine a relationship between an output variable (y) and two or more input variables (x_1, x_2, \dots, x_n). The most popular method of Least Squares is used to find these coefficients by minimizing the summed square of residuals (differences between observations and regression line). We note this equation as :

$$y = \beta_0 + \beta_1 \times x_1 + \beta_2 \times x_2 + \dots + \beta_n \times x_n = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i \times x_i \quad (2)$$

Where n is the number of input observations.

2.3.2 Feedforward Neural Network (FNN)

The FNN is the simplest type of neural networks (NNs) which is composed of three layers or more : one for the input, one for the output and one or more for the the hidden layers.

Input neurons correspond to the input parameter(s), the output neurons numbers correspond to the target output(s), the hidden layers and neurons numbers needs to be set according to the complexity of the problem. Several researchers proved that the three-layers FNN (with one hidden layer) is sufficient for non-linear function approximation and is represented in the class of universal approximators (Irie

and Miyake, 1988; Hornik et al., 1989; De Villiers and Barnard, 1993; Tamura and Tateishi, 1997), however, the number of hidden neurons must be chosen by increasing it and testing every time.

2.4 Salinity using satellite data

Instead of using (the not so accurate) SSS provided by satellites, we choose to follow the approach used in Benallal et al. (2016), Moussa et al. (2015) and Moussa et al. (2016). In this approach, SSS models are constructed using the MLR method, based on *in situ* latitude and SST, satellite data of latitude and SST from MODIS Aqua are then used to estimate SSS. This gives (1) more precision in term of resolution compared with SSS provided by satellite as SMOS (Soil Moisture and Ocean Salinity, <https://smos.cnes.fr/>) and AQUARIUS (<http://oceancolor.gsfc.nasa.gov/cms/data/aquarius>) (25 km × 25 km and 150 km × 150 km respectively) and (2) MODIS Aqua time coverage (since July 2002) is larger than that of SMOS (since November 2009) and AQUARIUS (between June 2011 and June 2015).

The SSS models were developed using the SURVOSTRAL database (section 2.1). It contains 502844 points which are divided into two subsets to have as much data in each subset : the first one contains 234165 points, and it is used to establish the models (75703 for R0, 86949 for R2 and 71713 for R4, from 2002/2003 to 2007/2008), the second one contains 291298 points, and is used for the validation processes (94993 for R0, 94532 for R2 and 101773 for R4, from 2008/2009 to 2014/2015). Finally, the models were tested using satellite SST data provided by MODIS Aqua, which correspond to the validation data points (in terms of time, latitude and longitude). In order to provide SSS with good accuracy, for each rotation, two experiments based on two types of MODIS Aqua data were performed :

- E1 : One day SST data.
- E2 : 8-days composite SST data. Each day of this image is represented by the 8-days composite image.

To evaluate each experiment, four error parameters were calculated : (1) the Mean Bias Error (MBE), (2) the Mean Absolute Error (MAE), (3) the Root Mean Square Error (RMSE) and (4) the Percentage of Lost Data (PLD) when extracting satellite data points that correspond to the *in situ* data (see appendix A for more details).

All these experiments are presented in the general algorithm of Figure 2 as "salinity model". As we see in this Figure, we used *in situ* data of latitude, SST and SSS to develop SSS models for each rotation. After that, we used latitude and SST from MODIS Aqua to estimate SSS. Results will be presented and discussed in Section 3.1.

2.5 $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using satellite data

After estimating SSS, the next challenge was to estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using satellite data. We use $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ instead of $p(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (partial pressure of CO_2^{sw}) because the CO_2^{sw} is a non-perfect gas (a perfect gas is a theoretical gas composed of many randomly moving point particles that do not interact). The ratio between the partial pressure and the fugacity of CO_2 varies in the interval $[0.996 - 0.997]$, with a SST in the range $[0^\circ\text{C} - 30^\circ\text{C}]$ and normal atmospheric pressure of 1 atm. For example, a $p(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ of 360 μatm at 25 $^\circ\text{C}$ represents a difference of 1 μatm with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, this difference is negligible given the associated error of the measurement (2 to 5 μatm)(?).

In order to estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, we have to determine which parameters affect the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, and to choose a method to develop the models. Ocean properties are driven by ocean circulation and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ depends mainly on solubility and marine biology. The solubility is driven by SST, earlier works studied the SST- $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ relationship (Gordon and Jones, 1973; Copin-Montegut, 1988; Goyet and Poisson, 1989; Goyet et al., 1993). This relationship was also used to map $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in many regions of the globe (Stephens et al., 1995; Lefèvre and Taylor, 2002; Inoue et al., 2003; Olsen et al., 2004; Lefèvre et al., 2005). Marine biology is also a parameter that modifies the total inorganic carbon in the ocean chemistry and causes direct variations of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (mainly through photosynthesis, respiration and decomposition processes). Laika et al. (2009) investigated the relative importance of biological and SST effects on $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variation in this region, and found that distribution of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is mainly associated with SST and chl-*a*.

The frequently used method for estimating $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is the MLR (Section 2.3.1), and recently the neural networks (NN) techniques. The MLR method was mainly used to provide empirical equation to estimate and map $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (for example Jamet et al. (2007) in the North Atlantic and Chierici et al. (2012) in the high-latitude Pacific sector of the Southern ocean). NN techniques are generally used to solve different problems, like Self-Organisation Map (SOM) by Kohonen (2001) for analysing and clustering high dimensional data space (Flexer, 1999; Xu and Wunsch, 2005; Lefèvre et al., 2005; Friedrich and Oschlies, 2009; Telszewski et al., 2009; Nakaoka et al., 2013), and FNN (Section 2.3.2) which has been widely used for non-linear regression, time-series prediction (Barreto and Araújo, 2002; Barreto, 2007) and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ interpolation (Landschützer et al., 2013; Zeng et al., 2014; Moussa et al., 2016). Lefèvre et al. (2005) and Moussa et al. (2016) reported that NN techniques predict $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ with a better accuracy than MLR. In this work we choose to use SST and chl-*a* as parameters and FNN as method.

The aim is to develop $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ model using *in situ* data, and after that, use satellite data to test it and

map the estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. We used the IMOS *in situ* database for this experiment. This step is presented as " $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ model" in Figure 2. To estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, we performed a FNN for each rotation. The input parameters are SST and chl-*a* (note that 8-days composite images of chl-*a* from MODIS Aqua were used for both training and testing steps; no *in situ* chl-*a* data were available for this work), and the output

parameter is the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (Section 2.3.2). This FNN was constructed with two input neurons for SST and chl-*a*, one output neuron for $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, and one hidden layer with number of neurons that increase from 1 to 50. The general algorithm followed in order to choose the best FNN is presented in Figure 3(a).

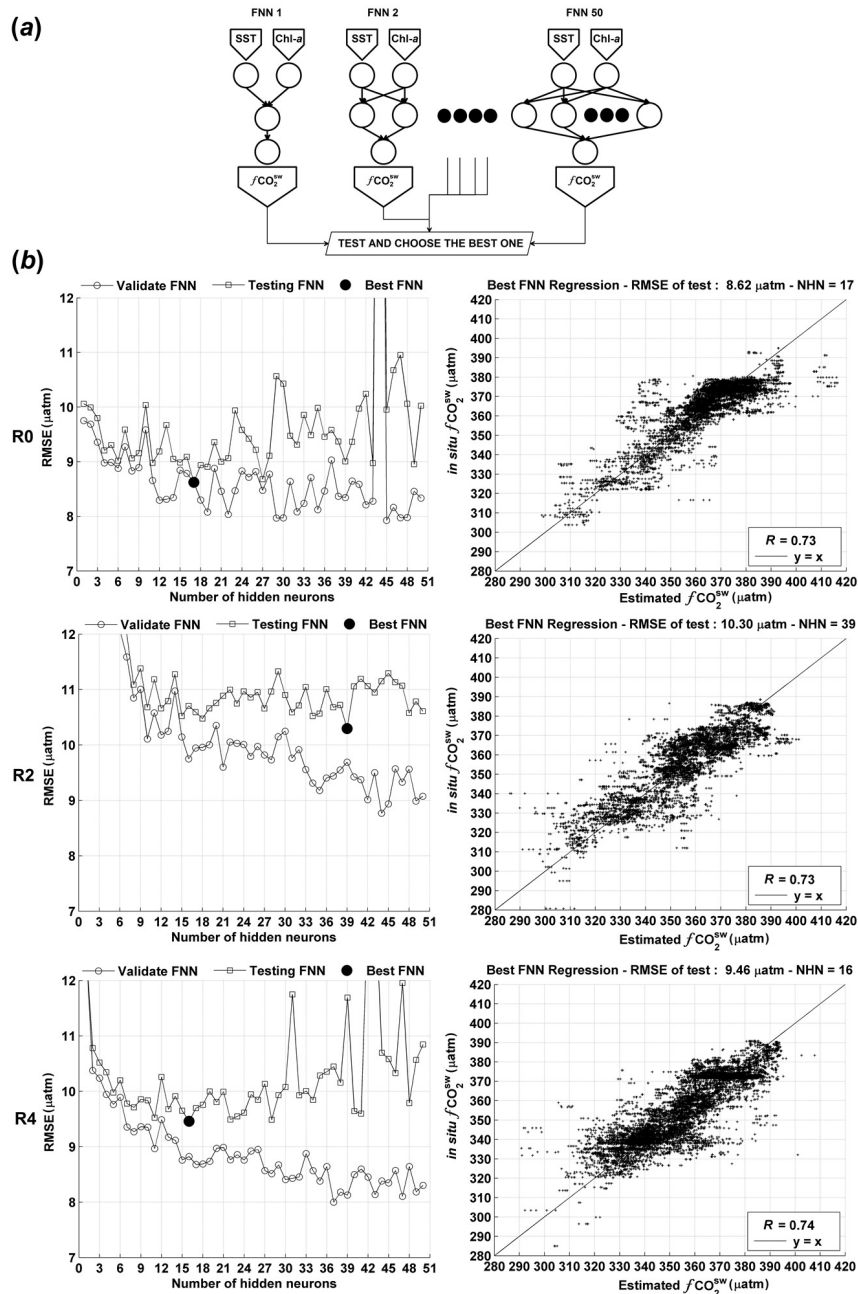


Figure 3: $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ modelling : (a) the followed algorithm for choosing the best FNN. (b) results of validation and test step for each rotation (left) and the regression of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ for the best FNN (right). R represents the coefficient of correlation.

To find the best FNN, for each rotation, fifty FNNs were performed corresponding to FNN with one to fifty hidden neurons respectively. Firstly, we begin by dividing the database into two uniform datasets which have the same time and space scales (from 2008/2009 to 2012/2013 for both datasets; 15864 for R0, 14034 for R2 and 24413 for R4). Then, for each FNN, we pass through 3 steps :

1. Train the FNN using the first dataset (we name it training dataset).
2. Validate the FNN using the second dataset (we name it validation dataset). We also performed a second *in situ* validation with MINERVE data points. Note that these data numbers are lower than IMOS (2452 for R0, 7508 for R2 and 2490 for R4).
3. Test the FNN with satellite data. All satellite data points correspond to the validation database points (in term of time, latitude and longitude).

The best FNN is chosen among the fifty FNNs according to the minimum of RMSE value in the test step. Results of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ modelling are presented in section 3.2.

3 Results and Discussions

3.1 Salinity

The results of the two experiments of the SSS estimation step (Section 2.4) are shown in Table 1. To choose the best type of data we compared the two experiments by their four error parameters. We choose the Experiment number 2 (E2, Table 1) as the best one because we noted that it represents the best compromise between the four error parameters:

- The MBE inform about the model shift and in our case, it is close to zero (-0.03 and in the same range as in E1).
- The MAE, which inform about the mean level of errors, is at its minimum in E2 (0.12).
- The RMSE, which is the most important error parameter, gives the model precision and is also at its minimum in E2 (0.16). Even if we look at the three rotations one by one, the RMSE of E2 in each rotation still better than E1.
- We see clearly in E1 that the use of one day satellite data causes a important PLD which involve a lack of comparable data (92% of loss, which is not representative of all spatio-temporal variations of SSS over all the studied area). The 51% of loosing data in E2 seems to be an acceptable loss that don't have a significant effect on the model and make satellite data available in all periods and areas as well as for *in situ* data.

		MBE			MAE			RMSE			PLD (%)		
		R0	R2	R4	R0	R2	R4	R0	R2	R4	R0	R2	R4
E1	V.	-0.04	-0.06	-0.02	0.12	0.14	0.14	0.18	0.19	0.20	94	89	93
	G.		-0.03			0.13			0.19			92	
E2	V.	-0.05	-0.02	-0.02	0.13	0.11	0.11	0.17	0.17	0.15	57	44	51
	G.		-0.03			0.12			0.16			51	

Table 1: Salinity modelling results. E1: One day satellite data as distributed online by the NASA, E2: 8-days composite satellite data as distributed online by the NASA, V: Value, G: Global result considering the three rotations.

A general RMSE of 0.16 was found for the three SSS model estimation. In order to confirm models accuracy, we performed a second test in which we provided a pairwise comparison between the modelled SSS ($\text{SSS}_{\text{Model}}$) starting with MODIS Aqua SST and the two SSS products from SMOS (SSS_{SMOS}) and AQUARIUS ($\text{SSS}_{\text{AQUARIUS}}$). Note that we performed an intersection of available data between MODIS Aqua vs. SMOS and MODIS Aqua vs. AQUARIUS data (a dataset between 2011/2012 and 2014/2015 was found respectively). Results are presented in Table 2, these

results confirm that our $\text{SSS}_{\text{Model}}$ gives, for the whole season, a lower RMSE than SSS provided by satellite: (1) 0.16 and 1.27 respectively for $\text{SSS}_{\text{Model}}$ vs. SSS_{SMOS} and (2) 0.13 and 0.48 respectively for $\text{SSS}_{\text{Model}}$ vs. $\text{SSS}_{\text{AQUARIUS}}$. These results show that models provide SSS with a better accuracy than that with satellite in this region, and represent a good alternative to get SSS maps from satellite SST. Figure 4(b) shows an example of mapping SSS starting with MODIS Aqua SST.

	SSS _{Model} vs. SSS _{SMOS}		SSS _{Model} vs. SSS _{AQUARIUS}	
	RMSE (SSS _{Model})	RMSE (SSS _{SMOS})	RMSE (SSS _{Model})	RMSE (SSS _{AQUARIUS})
R0	0.17	1.30	0.17	0.55
R2	0.15	1.29	0.10	0.42
R4	0.17	1.25	0.13	0.50
Global				
R0+R2+R4	0.16	1.27	0.13	0.48

Table 2: Pairwise comparison between modelled SSS (SSS_{Model}) and the two satellite SSS products (SSS_{SMOS} and SSS_{AQUARIUS}).

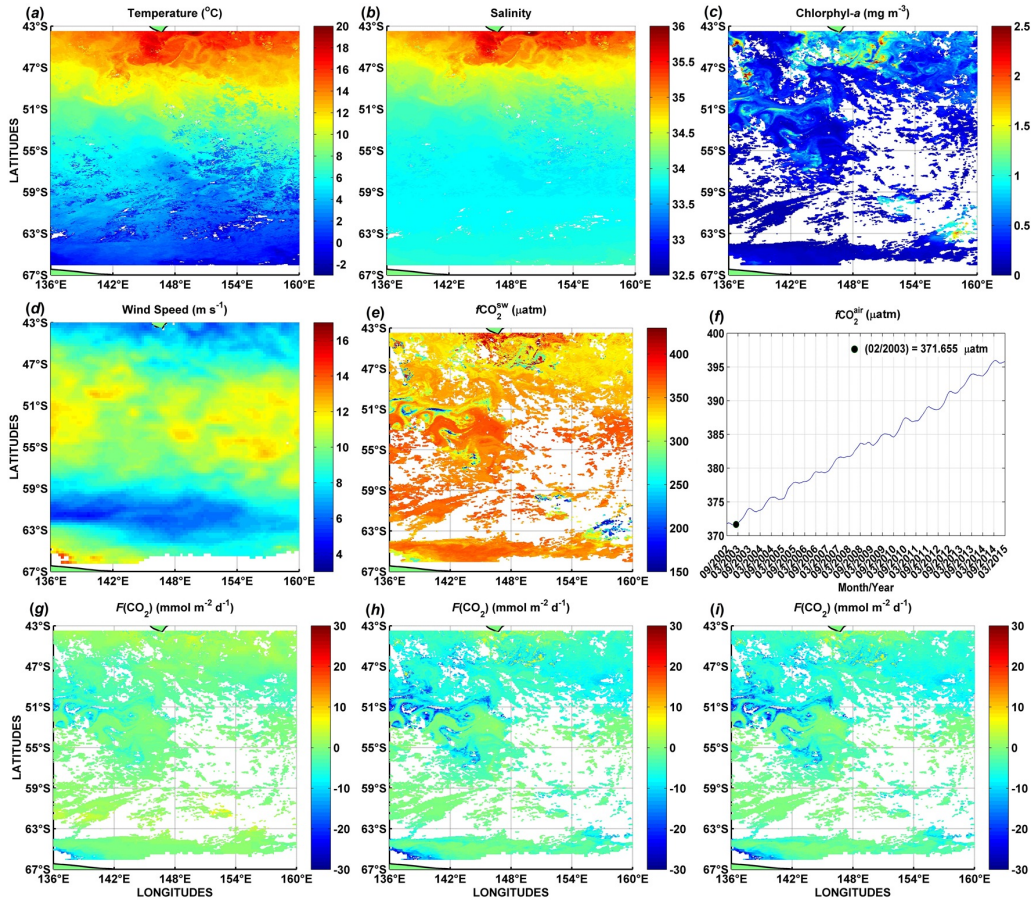


Figure 4: Example of mapping each parameter used to estimate $F(\text{CO}_2)$ for days between 02 Feb. 2003 and 09 Feb. 2003 : (a) 8-days composite image of MODIS Aqua SST. (b) Estimated SSS from MODIS Aqua SST using correspondent model. (c) 8-days composite image of MODIS Aqua Chlorophyll- a . (d) 8-days average WS corresponding to 8-days MODIS Aqua composite image. (e) Estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using MODIS Aqua SST and chl- a . (f) $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ from Cape Grim station (black point correspond to the title value). (g) Estimated $F(\text{CO}_2)$ using Liss and Merlivat (1986) equation. (h) Estimated $F(\text{CO}_2)$ using Ho et al. (2006) equation. (i) Estimated $F(\text{CO}_2)$ using Wanninkhof (2014) equation.

3.2 CO_2 fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$)

Results of the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ modelling, validating and testing (as described in Section 2.5) are presented in Table 3. Figure 3(b) presents RMSE values of the validation and the test steps, as well as the regressions of the best FNNs (using the IMOS database). The best FNNs for R0, R2 and R4 were respectively FNNs with 17, 39

and 16 hidden neurons. Training the FNNs gives a RMSE of 8.62, 9.70 and 8.82 μatm for R0, R2 and R4 respectively (Considering all rotations, we obtain a general RMSE of about 9.00 μatm). *In situ* validation gives almost the same RMSEs as for training (8.61, 9.67 and 8.81 μatm for R0, R2 and R4 respectively and a global RMSE of 8.99 μatm). The MINERVE

$f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ *in situ* data used as a second *in situ* validation (a different database from that used for the FNNs trainings) gives a global RMSE of 13.56 μatm (13.63, 13.43 and 13.82 μatm for R0, R2 and R4 respectively) which is acceptable regarding to the difference between

the two databases; actually, this database is still scarce in term of time coverage (only three rotations between 2004/2005 and 2006/2007, Section 2.1).

	Training	<i>in situ</i> validation		satellite test
	results	IMOS data	MINERVE data	using MODIS Aqua data
R0	8.62	8.61	13.63	8.62
R2	9.70	9.67	13.43	10.30
R4	8.81	8.81	13.82	9.46
Global R0+R2+R4	9.00	8.99	13.56	9.45

Table 3: fCOSW modelling results (RMSEs expressed in μatm) : training, validation with *in situ* data of MINERVE and IMOS, and testing with satellite of MODIS Aqua.

The test with satellite data is the most important step which determine the precision of the FNNs. Results presented in Figure 3(b) show that even if the RMSE of validation step (with *in situ* data) decreases when adding neurons to the hidden layer, this may not improve the RMSE in the test step (with satellite data). A good RMSE of about 8.62, 10.30 and 9.46 μatm for R0, R2, and R4 respectively was obtained (considering all rotations, we obtain a general RMSE of about 9.45 μatm). The coefficients of correlation (R) were 0.73, 0.73 and 0.74 respectively for R0, R2 and R4 (considering all rotations, a general R of 0.86 was obtained). Figure 4(e) shows an example of mapping $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ starting with MODIS Aqua SST and chl- a .

3.3 CO₂ air-sea flux ($F(\text{CO}_2)$)

The purpose of this study is to map $F(\text{CO}_2)$ using satellite data. The result's precision is estimated using *in situ* data as reference. We calculated the $F(\text{CO}_2)$ using equation 1 for both *in situ* and satellite data.

As cited previously, the k parameter was developed by several researchers, since the eighties until today (Table 4 presents a list of the most popular equations), k is directly affected by WS. Figure 5 shows

this relationship using the different gas transfer velocity equations (note that these equations were developed in different regions, with different conditions). As we can see, because of certain equations similarity, their plots are very close each other (for example, the two Sweeney et al. (2007) and Ho et al. (2011) (a) equations). The most used in literature is the Wanninkhof (1992) equation, which was recently improved in Wanninkhof (2014). We clearly see that at high WS ($\geq 20 \text{ m s}^{-1}$) the difference between references increase especially for Wanninkhof and McGillis (1999) and equation (b) of Ho et al. (2011). The reason is that these two equations were developed for steady wind with a speed lower than 20 m s^{-1} . In this paper, we compare results calculated with three references :

- Liss and Merlivat (1986) : the equation was developed for the three WS cases (low, high and medium), and it is one of the first used methods.
- Ho et al. (2006) : the equation was developed in the southern ocean near to the studied area (few hundred km from the coast of New Zealand).
- Wanninkhof (2014) : the equation is the last version of the most used equation of Wanninkhof (1992).

Reference	Correspondent Equation
1 Liss and Merlivat (1986)	if $u < 3.6$ then $k = 0.170 \times u \times (Sc/600)^{-2/3}$ else if $3.6 < u \leq 13$ then $k = (2.85 \times u - 9.65) \times (Sc/600)^{-0.5}$ else $k = (5 \times u - 49.3) \times (Sc/600)^{-0.5}$
2 Wanninkhof (1992)	if $u \leq 6$ then $k = 0.31 \times u^2 \times (Sc/660)^{-0.5}$ else $k = 0.39 \times u^2 \times (Sc/660)^{-0.5}$
3 Wanninkhof and McGillis (1999)	$k = 0.0283 \times u^3 \times (Sc/660)^{-0.5}$
4 Nightingale et al. (2000)	$(0.222 \times u^2 + 0.333 \times u) \cdot (Sc/600)^{-0.5}$
5 Jean-Baptiste et al. (2002)	$k = 1.45 \times u^{1.5} \times (Sc/310)^{-0.5}$
6 Ho et al. (2006)	$k = 0.266 \times u^2 \times (Sc/600)^{-0.5}$
7 Sweeney et al. (2007)	$k = 0.27 \times u^2 \times (Sc/660)^{-0.5}$
8 Wanninkhof et al. (2009)	$k = 3 + 0.1 \times u + 0.064 \times u^2 + 0.011 \times u^3 \cdot (Sc/660)^{-0.5}$
9 Ho et al. (2011) equation (a)	$k = 0.286 \times u^2 \times (Sc/600)^{-0.5}$
10 Ho et al. (2011) equation (b)	$k = 0.0298 \times u^3 \times (Sc/600)^{-0.5}$
11 Wanninkhof (2014)	$k = 0.251 \times u^2 \times (Sc/660)^{-0.5}$

Table 4: List of the most popular equations used to calculate the gas transfer velocity (k). u represent the WS (in m s^{-1}) et Sc the Shmidt number.

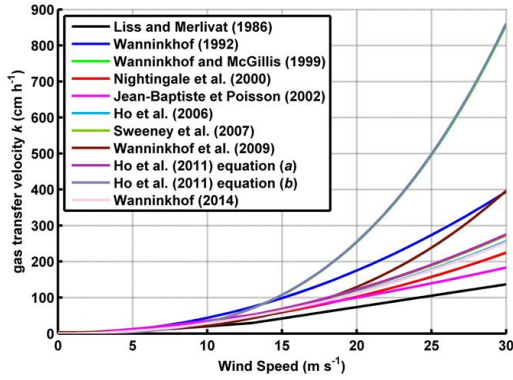


Figure 5: Gas Transfer Velocity (k) and WS relationship.

For each rotation, we present in Figure 6 a comparison between the calculated $F(\text{CO}_2)$ with both *in situ* and satellite data, and the regression between the two. Table 5 shows, for each reference, the RMSE of calculating $F(\text{CO}_2)$ between *in situ* and satellite data, as well as the R . The RMSE varies between 1.99 and 3.10 $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ and the R between 0.81 and 0.82. These results show that (1) using satellite data and interpolated data (using developed models of SSS and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) gives the ability to map $F(\text{CO}_2)$ over the region south of Australia and (2) this approach can be used with all k equations (The global R is almost the same for all equations, see appendix B for more details). Comparing with *in situ* data, this results allow us to provide $F(\text{CO}_2)$ maps during all the period from October to March using satellite data. Figure 4(g),(h) and (i) present an example of the mapped $F(\text{CO}_2)$ using all parameters (Figure 4(a) to (f)).

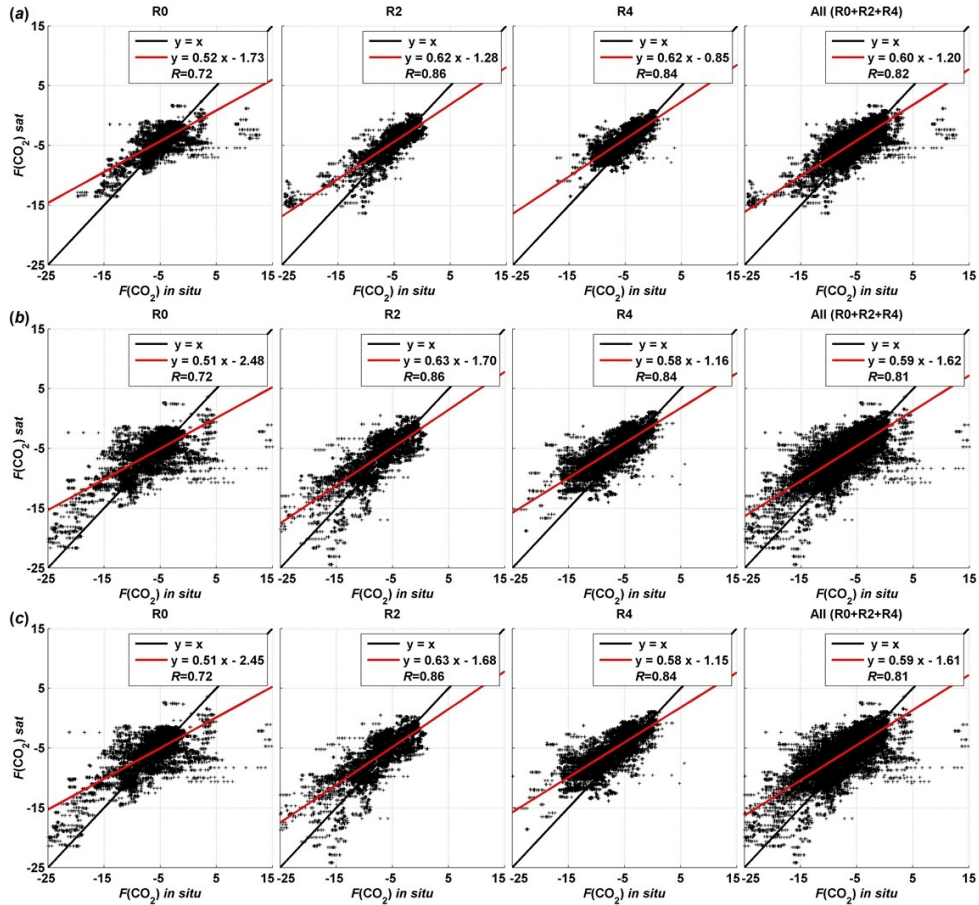


Figure 6: Comparison between the three references for $F(\text{CO}_2)$ calculated with *in situ* data ($F(\text{CO}_2)$ *in situ*) and with the estimated parameters using developed models ($F(\text{CO}_2)$ *sat*): (a) Using Liss and Merlivat (1986) equation. (b) Using Ho et al. (2006) equation. (c) Using Wanninkhof (2014) equation.

Equation Reference	RMSE (mmol CO ₂ m ⁻² d ⁻¹)			Global RMSE (mmol CO ₂ m ⁻² d ⁻¹)	Global R
	R0	R2	R4		
Liss and Merlivat (1986)	2.19	2.18	1.74	1.99	0.82
Ho et al. (2006)	3.39	3.30	2.76	3.10	0.81
Wanninkhof (2014)	3.36	3.27	2.73	3.07	0.81
Global R0+R2+R4	9.00	8.99	13.56	9.45	

Table 5: fCOSW modelling results (RMSEs expressed in μatm) : training, validation with *in situ* data of MINERVE and IMOS, and testing with satellite of MODIS Aqua.

Figure ?? presents results of estimating $F(\text{CO}_2)$. The interannual average distribution of $F(\text{CO}_2)$ between October and March from 2002/2003 to 2014/2015 show that, for the three references, this region of the austral ocean acts as a sink of CO_2 . This aptitude of absorbing CO_2 is becoming higher through the years, especially if we look at the two references of Ho et al. (2006) and Wanninkhof (2014) (which are almost the same because of the similarity of their equations, $F(\text{CO}_2)$ is slightly underestimated by Ho et al. (2006) equation). We also note that the sub-Antarctic region (SAR, north of the polar front (PF)) is a stronger

sink than the Antarctic Region (AR, south of the PF). The reason is that the surface $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is higher in the AR and this causes a lesser absorption of $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$.

If we look at the anomalies of the two Ho et al. (2006) and Wanninkhof (2014) (which are more appropriate to the studied region) we note a global anomaly of $-0.37 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ with a small difference between the AR and SAR anomalies (-0.34 and $-0.39 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ respectively).

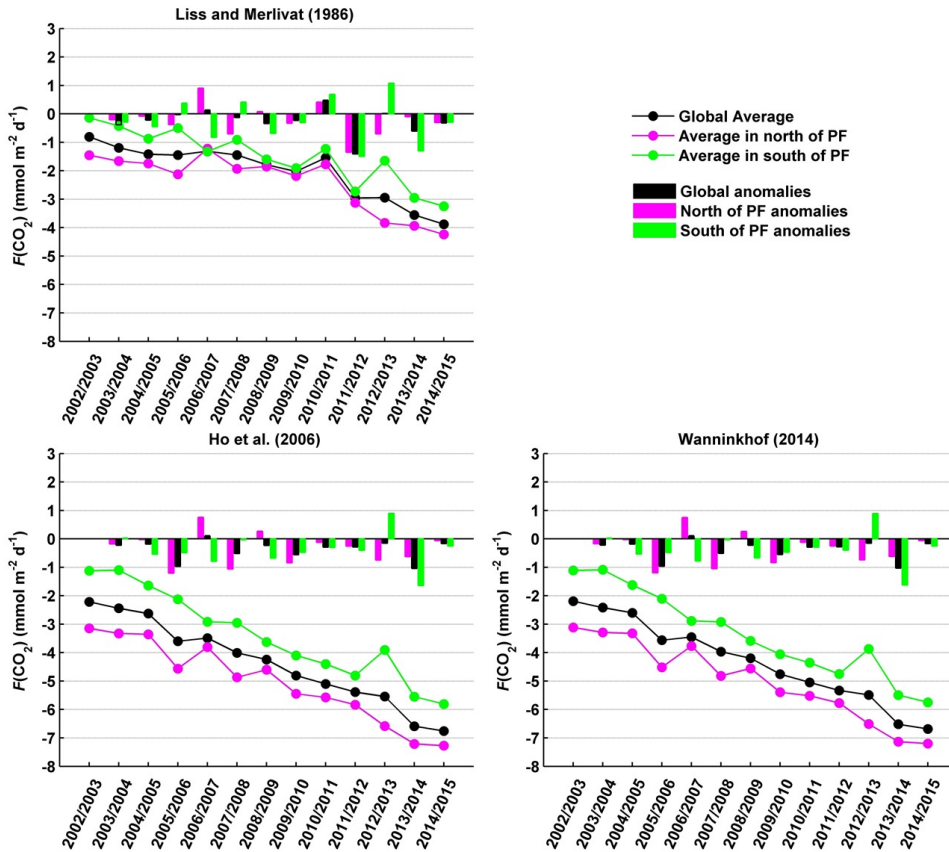


Figure 7: Inter-annual distributions and anomalies of estimated $F(\text{CO}_2)$ in the period of October-March.

This results show that the ocean react due to the increase of $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ (as we see with Cape Grim data in Figure 4(f)). We note a global average absorption of about $2 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2002/2003 to about $7 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2014/2015. Table 6 presents details about maximums, means and minimums of $F(\text{CO}_2)$ according to Wanninkhof (2014). We note the decreasing of the three values over the years, which confirm the fact that this region is steadily absorbing more and more atmospheric CO_2 , thus acidifying this ocean area.

October to March	maximum of $F(\text{CO}_2)$	mean of $F(\text{CO}_2)$	minimum of $F(\text{CO}_2)$
2002/2003	-0.49	-2.19	-4.46
2003/2004	-0.56	-2.42	-5.35
2004/2005	-1.39	-2.60	-7.18
2005/2006	-1.24	-3.56	-7.21
2006/2007	-2.02	-3.45	-5.14
2007/2008	-1.86	-3.97	-6.32
2008/2009	-2.25	-4.20	-6.39
2009/2010	-2.61	-4.76	-7.08
2010/2011	-3.33	-5.05	-6.90
2011/2012	-3.48	-5.33	-7.60
2012/2013	-3.81	-5.49	-7.67
2013/2014	-4.62	-6.52	-8.04
2014/2015	-4.35	-6.69	-9.06

Table 6: Maximum, mean and minimum of $F(\text{CO}_2)$ (expressed in $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$) presented following Wanninkhof (2014) equation with a precision of $\pm 3.07 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$.

Figure 8 presents the latitudinal distribution of the estimated $F(\text{CO}_2)$ using the last developed equation of Wanninkhof (2014) for the entire studied period. The first remark is that the increasing of CO_2 absorption is noticeable in all latitudes and zones throughout the years. From the north to the south, we see that the STZ is a stronger sink of CO_2 than the SAZ (from about $-4.45 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the STZ to $-2.75 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the SAZ in 2002/2003, and from about $-8.14 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the STZ to $-6.86 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the SAZ in 2014/2015). In Borges et al. (2007) the study of the STZ $F(\text{CO}_2)$ showed a direct relationship with the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in this zone, which is in with our results. This is mainly caused by the abundance of chl-*a* reflecting a higher phytoplankton activity. This causes a higher $\Delta f\text{CO}_2$ by consuming sea-water CO_2 , enhancing the atmospheric CO_2 absorption. The PFZ is the zone that absorbs less atmospheric CO_2 ; in this zone, the PF (about 45.5°S) causes an increasing of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ which reduces the absorption, however we note a global average $F(\text{CO}_2)$ values of about $-0.55 \pm 1 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2002/2003 to $-4.5 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2014/2015. The AR is marked by a decreasing values of $F(\text{CO}_2)$ from the POOZ to the SFZ (from about -1.72 ± 2 for the POOZ to $-2.75 \pm 2 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the SFZ in 2002/2003, and from about $-4.92 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the POOZ to $-6.25 \pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ for the SFZ in 2014/2015). In the

south of SFZ and the CAZ, we note a larger decreasing of the global $F(\text{CO}_2)$ average (from about $-4.00 \pm 5 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2002/2003 to $-9.00 \pm 6 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in 2014/2015). This higher absorption of atmospheric CO_2 is caused by the coupled effect of low temperature and the increasing chl-*a* (Moore and Abbott, 2000). However, we note a high fluctuation (higher standard deviations) which is mainly caused by region's dynamic and phytoplankton blooms episodes, presented by the upwelling of the Antarctic Bottom Water which is characterized by high $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ values. These results confirm the $F(\text{CO}_2)$ trend of previous works in the southern ocean (Metzl et al., 1995, 1999, 2006; McNeil et al., 2007; Boutin et al., 2008).

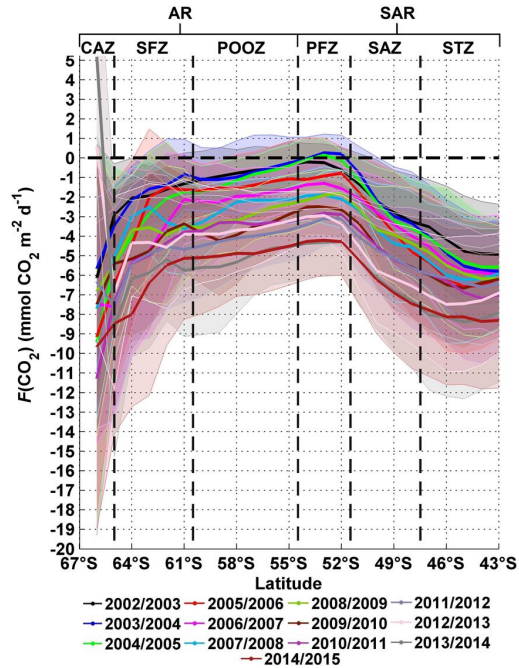


Figure 8: Average latitudinal distributions of the estimated $F(\text{CO}_2)$ in the period of October-March for the last developed equation of Wanninkhof (2014), shaded colors represent the standard deviations.

4 Conclusion

In this study, an algorithm was presented in order to develop models to estimate $F(\text{CO}_2)$ calculation parameters using satellite data. Figure 4 shows an example of mapping each parameter used to calculate $F(\text{CO}_2)$. This Figure represents results of each step presented in the general algorithm (Figure 2).

We started by the estimation of SSS over the period of October to March. The best type of image for this purpose was the 8-days composite images from MODIS Aqua. A RMSE of 0.16 was found for estimating SSS. We showed how we can use the MLR method (based on latitude and SST) to provide SSS with better accu-

racy than satellites like SMOS and AQUARIUS, and with a bigger spatio-temporal coverage ($4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$, since 2002). This result represents a good alternative to provide SSS maps from satellite data when satellite SST is available (As long as satellite SSS precision still low in this region).

The next step was estimating $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, we showed how we used the FNN method to develop a neural network for each rotation. A global RMSE of about $9.45 \mu\text{atm}$ was found using satellite data. We used these neural networks to map the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using exclusively satellite data (SST and chl-*a* from MODIS Aqua).

We further showed how we proceed to map $F(\text{CO}_2)$ using satellite data. We map $F(\text{CO}_2)$ at a resolution of $4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$ with a precision of about $\pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$ in the austral ocean south of Australia. Results show that this region is becoming an increasing sink of atmospheric CO_2 over the years.

This approach allows us to provide all parameters for $F(\text{CO}_2)$ calculation using remote sensing data of SST and chl-*a* (only $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ for the tests was provided by the Cape Grim Station). *In situ* measurements provided by all projects are still very important to improve models and to calibrate remote sensing data. As a perspective for this work, all models of MLR and FNN, source codes, estimated parameters and maps will be compiled in a database to be published and related to this work in order to provide materials for comparison with other scientific results in this region. This will contribute on the global estimation of ocean CO_2 exchange to improve our knowledge of ocean reaction due to air CO_2 increasing, and its impact on ocean acidification.

Acknowledgements

We would like to thanks all data providers without whom, this work would not have been possible :

- Australian under-way CO_2 data ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) was sourced from the Integrated Marine Observing System (IMOS) which is supported by the Australian Government through the National Collaborative Research Infrastructure Strategy and the Super Science Initiative.
- Temperature and Salinity was provided by the SURVOSTRAL project which is the result of a partnership between several institutions : (1) The IPEV (Institut polaire français Paul Emile Victor) that supports the administrative organization and provides the logistics framework, human resources, and technical and financial resources to the development of French research in the Polar Regions, (2) The LEGOS (Laboratoire d'Etudes en Géophysique et Océanographie Spatiales) laboratory, which is responsible for analysing and distribution thermosalinograph data, (3) The CSIRO which provide technical

support, including the development of software for recording and analysis data and (4) The SIO (Scripps Institution of Oceanography), which participate in the development of deep ocean observing technologies and provides instruments for the program.

- Data of SST and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ provided by the MINERVE project also supported by the IPEV.
- $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ data from the Cape Grim station was provide by the CSIRO Marine and Atmospheric Research and the Australian Bureau of Meteorology (Cape Grim Baseline Air Pollution Station).
- Satellite Data from MODIS Aqua and web resources were provided by the Ocean Biology Distributed Active Archive Center (OB.DAAC).
- ASCAT and QSCAT data were produced by Remote Sensing Systems with thanks to the NASA Ocean Vector Winds Science Team for funding and support.

I am particularly grateful to the RV *L'Astrolabe* crew and all volunteers who participate to research cruises on-board it. A special thanks to PhD funders : (1) the Algerian Ministry of Higher Education and Scientific Research (MESRS) for M.A. BENALLAL and H. MOUSSA, and (2) the the Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for J.M. Lencina-Avila. Thanks to them for giving us the opportunity to undertake research at the IMAGES-ESPACE_DEV laboratory.

Appendices

A Definition of SSS error parameters

Here we present the error parameters used to choose the best type of SST satellite data in SSS estimation. e_i and n represent error and number of data points respectively :

- The Mean Bias Error (MBE) computed as :

$$MBE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i \right] \quad (3)$$

- The Mean Absolute Error (MAE) computed as :

$$MAE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |e_i| \right] \quad (4)$$

- The Root Mean Square Error (RMSE) computed as :

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

- The Percentage of Lost Data (PLD) represent the proportion (%) of *in situ* data with no corresponding satellite data.

B All $F(\text{CO}_2)$ results

Table 7 presents the application of the approach with all k equations presented in Table 4. This results

confirm that the R remains high when using different equations; the approach presented in this paper is than independent and can be used for all equations.

Equation	R0		R2		R4		Glob.	Glob.
	RMSE	R	RMSE	R	RMSE	R	RMSE	R
1 Liss and Merlivat (1986)	2.19	0.72	2.18	0.86	1.74	0.84	2.00	0.82
2 Wanninkhof (1992)	5.22	0.72	5.07	0.86	4.25	0.84	4.76	0.81
3 Wanninkhof and McGillis (1999)	5.88	0.66	5.80	0.86	3.93	0.82	5.07	0.78
4 Nightingale et al. (2000)	3.11	0.73	3.03	0.86	2.56	0.84	2.85	0.81
5 Jean-Baptiste et al. (2002)	3.44	0.75	3.38	0.85	3.02	0.84	3.24	0.82
6 Ho et al. (2006)	3.39	0.72	3.30	0.86	2.76	0.84	3.10	0.81
7 Sweeney et al. (2007)	3.61	0.72	3.51	0.86	2.94	0.84	3.30	0.81
8 Wanninkhof et al. (2009)	4.17	0.66	4.15	0.82	2.97	0.81	3.67	0.77
9 Ho et al. (2011) (a)	3.65	0.72	3.55	0.86	2.97	0.84	3.33	0.81
10 Ho et al. (2011) (b)	5.90	0.66	5.82	0.86	3.94	0.82	5.09	0.78
11 Wanninkhof (2014)	3.36	0.72	3.27	0.86	2.73	0.84	3.07	0.81

Table 7: $F(\text{CO}_2)$ results for all equations. The RMSE (expressed in $\text{mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$) is calculated using the $F(\text{CO}_2)$ calculated with *in situ* data and with estimated parameters and the R is the coefficient of correlation between the two. Glob. : Global.

References

- Barreto, G. A. (2007). Time Series Prediction with the Self-Organizing Map: A Review. In Hammer, D. B. and Hitzler, D. P., editors, *Perspectives of Neural-Symbolic Integration*, volume 77, pages 135–158. Springer Berlin Heidelberg.
- Barreto, G. A. and Araújo, A. F. R. (2002). Non-linear Modeling of Dynamic Systems with the Self-Organizing Map. In Dorronsoro, J. R., editor, *Artificial Neural Networks — ICANN 2002*, pages 975–980. Springer Berlin Heidelberg.
- Benallal, M., Moussa, H., Touratier, F., Goyet, C., and Poisson, A. (2016). Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean. *Antarctic Science*, 28(02):127–134.
- Borges, A. V., Tilbrook, B., Metzl, N., Lenton, A., and Delille, B. (2007). Inter-annual variability of the carbon dioxide oceanic sink south of Tasmania. *Biogeosciences Discussions*, 4(5):3639–3671.
- Boutin, J., Merlivat, L., HÉnocq, C., Martin, N., and SallÉe, J. B. (2008). Air-sea CO_2 flux variability in frontal regions of the Southern Ocean from Carbon Interface Ocean Atmosphere drifters. *Limnology and Oceanography*, 53(5part2):2062–2079.
- Brewer, P. G. (1978). Direct observation of the oceanic CO_2 increase. *Geophysical Research Letters*, 5(12):997–1000.
- Bureau International Des Poids Et Mesures (1955). *Dixième conférence générale des poids et mesures*. Technical report, Bureau International Des Poids Et Mesures, Quai des Grands-Augustins, 55, Paris.
- Chaigneau, A. and Morrow, R. (2002). Surface temperature and salinity variations between Tasmania and Antarctica, 1993–1999. *Journal of Geophysical Research: Oceans (1978–2012)*, 107(C12):SRF–22.
- Chen, G.-T. and Millero, F. J. (1979). Gradual increase of oceanic CO_2 . *Nature*, 277(5693):205–206.
- Chierici, M., Signorini, S. R., Mattsdotter-Björk, M., Fransson, A., and Olsen, A. (2012). Surface water fCO_2 algorithms for the high-latitude Pacific sector of the Southern Ocean. *Remote Sensing of Environment*, 119:184–196.
- Copin-Montegut, C. (1988). A new formula for the effect of temperature on the partial pressure of CO_2 in seawater. *Marine Chemistry*, 25(1):29–37.
- De Villiers, J. and Barnard, E. (1993). Backpropagation neural nets with one and two hidden layers. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 4(1):136–141.
- Dlugokencky and Tans, P. (2016). Trends in Atmospheric Carbon Dioxide.
- Feely, R., Sabine, C., Takahashi, T., and Wanninkhof, R. (2001). Uptake and Storage of Carbon Dioxide in the Ocean: The Global CO_2 Survey. *Oceanography*, 14(4):18–32.
- Flexer, A. (1999). On the Use of Self-Organizing Maps for Clustering and Visualization. In Żytkow, J. M. and Rauch, J., editors, *Principles of Data Mining and Knowledge Discovery*, number 1704 in Lecture Notes in Computer Science, pages 80–88. Springer Berlin Heidelberg. DOI: 10.1007/978-3-540-48247-5.9.
- Friedrich, T. and Oeschler, A. (2009). Neural network-based estimates of North Atlantic surface pCO_2 from satellite data: A methodological study. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 114(C3):C03020.

- Gordon, L. I. and Jones, L. B. (1973). The effect of temperature on carbon dioxide partial pressures in seawater. *Marine Chemistry*, 1(4):317–322.
- Goyet, C., Millero, F. J., Poisson, A., and Shafer, D. K. (1993). Temperature dependence of CO₂ fugacity in seawater. *Marine Chemistry*, 44(2):205–219.
- Goyet, C. and Poisson, A. (1989). New determination of carbonic acid dissociation constants in seawater as a function of temperature and salinity. *Deep Sea Research Part A. Oceanographic Research Papers*, 36(11):1635–1654.
- Ho, D. T., Law, C. S., Smith, M. J., Schlosser, P., Harvey, M., and Hill, P. (2006). Measurements of air-sea gas exchange at high wind speeds in the Southern Ocean: Implications for global parameterizations. *Geophysical Research Letters*, 33(16).
- Ho, D. T., Wanninkhof, R., Schlosser, P., Ullman, D. S., Hebert, D., and Sullivan, K. F. (2011). Toward a universal relationship between wind speed and gas exchange: Gas transfer velocities measured with 3He/SF₆ during the Southern Ocean Gas Exchange Experiment. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 116(C4):C00F04.
- Hornik, K., Stinchcombe, M., and White, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366.
- IAPSO Working Group on Symbols, Units, and Nomenclature in Physical Oceanography. (1985). *The International System of Units (SI) in oceanography : report of IAPSO Working Group on Symbols, Units, and Nomenclature in Physical Oceanography (SUN)*. Unesco, Paris.
- Inoue, H. Y., Ishii, M., Matsueda, H., Kawano, T., Murata, A., and Takasugi, Y. (2003). Distribution of the partial pressure of CO₂ in surface water (pCO_{2w}) between Japan and the Hawaiian Islands: pCO_{2w}-SST relationship in the winter and summer. *Tellus B*, 55(2):456–465.
- Irie, B. and Miyake, S. (1988). Capabilities of three-layered perceptrons. In *IEEE International Conference on Neural Networks, 1988*, pages 641–648 vol.1.
- Jamet, C., Moulin, C., Lefèvre, N., and others (2007). Estimation of the oceanic pCO₂ in the North Atlantic from VOS lines in-situ measurements: parameters needed to generate seasonally mean maps. In *Annales Geophysicae*, volume 25, pages 2247–2257.
- Jean-Baptiste, P., Fourné, E., and Poisson, A. (2002). Gas Transfer Velocities for 3He in a Lake at High Wind Speeds. In Donelan, M. A., Mennan, W., Saltzman, E. S., and Wanninkhof, R., editors, *Gas Transfer at Water Surfaces*, pages 233–238. American Geophysical Union.
- Kohonen, T. (2001). *Self-Organizing Maps*, volume 30 of *Springer Series in Information Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- Laika, H., Goyet, C., Vouve, F., Poisson, A., and Touratier, F. (2009). Interannual properties of the CO₂ system in the Southern Ocean south of Australia. *Antarctic Science*, 21(06):663.
- Landschützer, P., Gruber, N., Bakker, D. C. E., Schuster, U., Nakaoka, S., Payne, M. R., Sasse, T. P., and Zeng, J. (2013). A neural network-based estimate of the seasonal to inter-annual variability of the Atlantic Ocean carbon sink. *Biogeosciences*, 10(11):7793–7815.
- Le Quéré, C., Moriarty, R., Andrew, R. M., Canadell, J. G., Sitch, S., Korsbakken, J. I., Friedlingstein, P., Peters, G. P., Andres, R. J., Boden, T. A., Houghton, R. A., House, J. I., Keeling, R. F., Tans, P., Arneth, A., Bakker, D. C. E., Barbero, L., Bopp, L., Chang, J., Chevallier, F., Chini, L. P., Ciais, P., Fader, M., Feely, R. A., Gkritzalis, T., Harris, I., Hauck, J., Ilyina, T., Jain, A. K., Kato, E., Kitidis, V., Klein Goldewijk, K., Koven, C., Landschützer, P., Lauvset, S. K., Lefèvre, N., Lenton, A., Lima, I. D., Metzl, N., Millero, F., Munro, D. R., Murata, A., Nabel, J. E. M. S., Nakaoka, S., Nojiri, Y., O’Brien, K., Olsen, A., Ono, T., Pérez, F. F., Pfeil, B., Pierrot, D., Poulter, B., Rehder, G., Rödenbeck, C., Saito, S., Schuster, U., Schwinger, J., Séférian, R., Steinhoff, T., Stocker, B. D., Sutton, A. J., Takahashi, T., Tilbrook, B., van der Laan-Luijkx, I. T., van der Werf, G. R., van Heuven, S., Vandemark, D., Viovy, N., Wiltshire, A., Zaehle, S., and Zeng, N. (2015). Global Carbon Budget 2015. *Earth System Science Data*, 7(2):349–396.
- Le Quéré, C., Moriarty, R., Andrew, R. M., Peters, G. P., Ciais, P., Friedlingstein, P., Jones, S. D., Sitch, S., Tans, P., Arneth, A., Boden, T. A., Bopp, L., Bozec, Y., Canadell, J. G., Chevallier, F., Cosca, C. E., Harris, I., Hoppema, M., Houghton, R. A., House, J. I., Jain, A., Johannessen, T., Kato, E., Keeling, R. F., Kitidis, V., Klein Goldewijk, K., Koven, C., Landa, C. S., Landschützer, P., Lenton, A., Lima, I. D., Marland, G., Mathis, J. T., Metzl, N., Nojiri, Y., Olsen, A., Ono, T., Peters, W., Pfeil, B., Poulter, B., Raupach, M. R., Regnier, P., Rödenbeck, C., Saito, S., Salisbury, J. E., Schuster, U., Schwinger, J., Séférian, R., Segsneider, J., Steinhoff, T., Stocker, B. D., Sutton, A. J., Takahashi, T., Tilbrook, B., van der Werf, G. R., Viovy, N., Wang, Y.-P., Wanninkhof, R., Wiltshire, A., and Zeng, N. (2014). Global carbon budget 2014. *Earth System Science Data Discussions*, 7(2):521–610.
- Lefèvre, N. and Taylor, A. (2002). Estimating pCO₂ from sea surface temperatures in the Atlantic gyres. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 49(3):539–554.
- Lefèvre, N., Watson, A. J., and Watson, A. R. (2005). A comparison of multiple regression and neural network techniques for mapping in situ pCO₂ data. *Tellus B*, 57(5):375–384.

- Liss, P. S. and Merlivat, L. (1986). Air-Sea Gas Exchange Rates: Introduction and Synthesis. In Buat-Ménard, P., editor, *The Role of Air-Sea Exchange in Geochemical Cycling*, number 185 in NATO ASI Series, pages 113–127. Springer Netherlands.
- McNeil, B. I., Metzl, N., Key, R. M., Matear, R. J., and Corbiere, A. (2007). An empirical estimate of the Southern Ocean air-sea CO₂ flux. *Global Biogeochemical Cycles*, 21(3):GB3011.
- Metzl, N., Brunet, C., Jabaud-Jan, A., Poisson, A., and Schauer, B. (2006). Summer and winter air-sea CO₂ fluxes in the Southern Ocean. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 53(9):1548–1563.
- Metzl, N., Poisson, A., Louanchi, F., Brunet, C., Schauer, B., and Bres, B. (1995). Spatio-temporal distributions of air-sea fluxes of CO₂ in the Indian and Antarctic oceans. *Tellus B*, 47(1-2):56–69.
- Metzl, N., Tilbrook, B., and Poisson, A. (1999). The annual fCO₂ cycle and the air-sea CO₂ flux in the sub-Antarctic Ocean. *Tellus B*, 51(4):849–861.
- Moore, J. K. and Abbott, M. R. (2000). Phytoplankton chlorophyll distributions and primary production in the Southern Ocean. *Journal of Geophysical Research: Oceans (1978–2012)*, 105(C12):28709–28722.
- Morrow, R. and Kestenare, E. (2014). Nineteen-year changes in surface salinity in the Southern Ocean south of Australia. *Journal of Marine Systems*, 129:472–483.
- Morrow, R., Valladeau, G., and Sallee, J.-B. (2008). Observed subsurface signature of Southern Ocean sea level rise. *Progress in Oceanography*, 77(4):351–366.
- Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., Lefevre, N., EL Jai, M. C., Guglielmi, V., and Touratier, F. (2015). A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data. *ESAIM: Proceedings and Surveys*, 49:65–77.
- Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., and Lefevre, N. (2016). Satellite-derived CO₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic Ocean using a feed-forward neural network. *International Journal of Remote Sensing*, 37(3):580–598.
- Nakaoka, S., Telszewski, M., Nojiri, Y., Yasunaka, S., Miyazaki, C., Mukai, H., and Usui, N. (2013). Estimating temporal and spatial variation of ocean surface CO₂ in the North Pacific using a self-organizing map neural network technique. *Biogeosciences*, 10(9):6093–6106.
- NASA Goddard Space Flight Center, Ocean Ecology Laboratory, Ocean Biology Processing Group (2014). MODIS-Aqua Ocean Color Data. Technical report, NASA Goddard Space Flight Center, Ocean Ecology Laboratory, Ocean Biology Processing Group.
- Nightingale, P. D., Malin, G., Law, C. S., Watson, A. J., Liss, P. S., Liddicoat, M. I., Boutin, J., and Upstill-Goddard, R. C. (2000). In situ evaluation of air-sea gas exchange parameterizations using novel conservative and volatile tracers. *Global Biogeochemical Cycles*, 14(1):373–387.
- Olsen, A., Triñanes, J. A., and Wanninkhof, R. (2004). Sea-air flux of CO₂ in the Caribbean Sea estimated using in situ and remote sensing data. *Remote Sensing of Environment*, 89(3):309–325.
- Sabine, C. L., Feely, R. A., Gruber, N., Key, R. M., Lee, K., Bullister, J. L., Wanninkhof, R., Wong, C. S., Wallace, D. W. R., Tilbrook, B., Millero, F. J., Peng, T.-H., Kozyr, A., Ono, T., and Rios, A. F. (2004). The Oceanic Sink for Anthropogenic CO₂. *Science*, 305(5682):367–371.
- Sallée, J.-B., Matear, R. J., Rintoul, S. R., and Lenton, A. (2012). Localized subduction of anthropogenic carbon dioxide in the Southern Hemisphere oceans. *Nature Geoscience*, 5(8):579–584.
- Sarmiento, J. L. and Gruber, N. (2002). Sinks for anthropogenic carbon. *Physics Today*, 55(8):30–36.
- Siegenthaler, U. and Sarmiento, J. L. (1993). Atmospheric carbon dioxide and the ocean. *Nature*, 365(6442):119–125.
- Stephens, M. P., Samuels, G., Olson, D. B., Fine, R. A., and Takahashi, T. (1995). Sea-air flux of CO₂ in the North Pacific using shipboard and satellite data. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 100(C7):13571–13583.
- Sweeney, C., Gloor, E., Jacobson, A. R., Key, R. M., McKinley, G., Sarmiento, J. L., and Wanninkhof, R. (2007). Constraining global air-sea gas exchange for CO₂ with recent bomb 14c measurements. *Global Biogeochemical Cycles*, 21(2):GB2015.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Sweeney, C., Poisson, A., Metzl, N., Tilbrook, B., Bates, N., Wanninkhof, R., Feely, R. A., Sabine, C., and others (2002). Global sea-air CO₂ flux based on climatological surface ocean pCO₂, and seasonal biological and temperature effects. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 49(9):1601–1622.
- Tamura, S. and Tateishi, M. (1997). Capabilities of a four-layered feedforward neural network: four layers versus three. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 8(2):251–255.
- Telszewski, M., Chazottes, A., Schuster, U., Watson, A. J., Moulin, C., Bakker, D. C. E., González-Dávila, M., Johannessen, T., Körtzinger, A., Lüger, H., Olsen, A., Omar, A., Padin, X. A., Ríos, A. F., Steinhoff, T., Santana-Casiano, M., Wallace, D.

- W. R., and Wanninkhof, R. (2009). Estimating the monthly pCO₂ distribution in the North Atlantic using a self-organizing neural network. *Biogeosciences*, 6(8):1405–1421.
- Tilbrook, B., Neill, C., and Akl, J. (2013). Integrated Marine Observing System (IMOS) sea surface and atmospheric fCO₂ measurements in the Southern Ocean onboard MV L’Astrolabe in 2013. *Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee*.
- Wanninkhof, R. (1992). Relationship between wind speed and gas exchange over the ocean. *Journal of Geophysical Research*, 97(C5):7373.
- Wanninkhof, R. (2014). Relationship between wind speed and gas exchange over the ocean revisited: Gas exchange and wind speed over the ocean. *Limnology and Oceanography: Methods*, 12(6):351–362.
- Wanninkhof, R., Asher, W. E., Ho, D. T., Sweeney, C., and McGillis, W. R. (2009). Advances in Quantifying Air-Sea Gas Exchange and Environmental Forcing*. *Annual Review of Marine Science*, 1(1):213–244.
- Wanninkhof, R. and McGillis, W. R. (1999). A cubic relationship between air-sea CO₂ exchange and wind speed. *Geophysical Research Letters*, 26(13):1889–1892.
- Weiss (1974). Carbon dioxide in water and seawater: the solubility of a non-ideal gas. *Marine Chemistry*, 2:203–215.
- Xu, R. and Wunsch, D., I. (2005). Survey of clustering algorithms. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 16(3):645–678.
- Zeng, J., Nojiri, Y., Landschützer, P., Telszewski, M., and Nakaoka, S. (2014). A Global Surface Ocean fCO₂ Climatology Based on a Feed-Forward Neural Network. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 31(8):1838–1849.
- Zhu, Y., Shang, S., Zhai, W., and Dai, M. (2009). Satellite-derived surface water pCO₂ and air-sea CO₂ fluxes in the northern South China Sea in summer. *Progress in Natural Science*, 19(6):775–779.

A.2 Contribution à d'autres articles

A.2.1 A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data

- **Journal** : ESAIM : Proceedings And Surveys, EDP Sciences Journals List.
- **Date de publication** : 13 Mars 2015.
- **DOI** : 10.1051/proc/201549006.
- **Résumé** : En utilisant des mesures de Salinité et de Température à la surface de la mer, dans l'ouest de l'océan Atlantique tropical, de 2003 à 2007 puis 2009, on compare deux approches pour la prédiction de la Salinité dans l'eau de mer de surface : la Régression Non-linéaire Multiple et le Perceptron Multi-Couches. Dans la première expérience, 18300 mesures *in situ* sont utilisées dans la construction des deux modèles et 503 points pour tester leur extrapolation. Dans la deuxième expérience, 15668 mesures *in situ* sont utilisées pour établir les deux modèles et 3232 points pour tester leur interpolation. Les résultats montrent que la Régression Non-linéaire Multiple peut être appliquée à la fois pour l'extrapolation et l'interpolation. Cependant, le Perceptron Multi Couches ne peut être utilisé que pour l'interpolation.
- **Citation** : Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., Lefevre, N., EL Jai, M. C., Guglielmi, V., and Touratier, F. (2015). A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data. ESAIM : Proc., 49, 65–77. doi:10.1051/proc/201549006

A Comparison Of Multiple Non-Linear Regression And Neural Network Techniques For Sea Surface Salinity Estimation In The Tropical Atlantic Ocean Based On Satellite Data

H. MOUSSA^{1,2} M.A. BENALLAL^{1,2} C. GOYET^{1,2} N. Lefèvre^{3,4} M.C. EL JAI^{1,2}
 V. GUGLIELMI^{1,2} F. TOURATIER^{1,2}

ESAIM: PROCEEDINGS AND SURVEYS, February 2015, Vol. 49, p. 65-78
 CMACS 2014 - Colloque de Modélisation, Analyse et Contrôle des Systèmes
 (final draft post-refereeing)
 DOI:<http://dx.doi.org/10.1051/proc/201549006>

¹IMAGES ESPACE-DEV, Université de Perpignan Via Domitia, 52 Avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan Cedex 9, France.

²ESPACE-DEV, UG UA UR UM IRD, Maison de la télédétection, 500 Rue Jean-François Breton, 34093 Montpellier Cedex 5, France.

³IRD LOCEAN, Université Pierre et Marie Curie, UMR 7159, Paris, France.

⁴Lab. Oceanografia Física Estuarina e Costeira, Universidade Federal de Pernambuco, Av. Arquitetura, Brasil.

hadjer.moussa@univ-perp.fr

Abstract

Using measurements of Sea Surface Salinity and Sea Surface Temperature in the Western Tropical Atlantic Ocean, from 2003 to 2007 and 2009, we compare two approaches for estimating Sea Surface Salinity : Multiple Non-linear Regression and Multi Layer Perceptron. In the first experiment, we use 18,300 *in situ* data points to establish the two models, and 503 points for testing their *extrapolation*. In the second experiment, we use 15,668 *in situ* measurements for establishing the models, and 3,232 data points to test their *interpolation*. The results show that the Multiple Non-linear Regression is an admissible solution whether it be *interpolation* or *extrapolation*. Yet, the Multi Layer Perceptron can be used only for *interpolation*.

Résumé

En utilisant des mesures de Salinité et de Température à la surface de la mer, dans l'ouest de l'océan Atlantique tropical, de 2003 à 2007 puis 2009, on compare deux approches pour la prédiction de la Salinité dans l'eau de mer de surface : la Régression Non-linéaire Multiple et le Perceptron Multi Couches. Dans la première expérience, 18 300 mesures *in situ* sont utilisées dans la construction des deux modèles et 503 points pour tester leur *extrapolation*. Dans la deuxième expérience, 15 668 mesures *in situ* sont utilisées pour établir les deux modèles et 3 232 points pour tester leur *interpolation*. Les résultats montrent que la Régression Non-linéaire Multiple peut être appliquée à la fois pour l'*extrapolation* et l'*interpolation*. Cependant, le Perceptron Multi Couches ne peut être utilisé que pour l'*interpolation*.

Published online 13 March 2015 by EDP Sciences

1 Introduction

The tropical Atlantic Ocean (23°S - 23°N) is a highly dynamic region. It is generally characterized by high carbon dioxide fugacity (fCO_2) in surface sea-water. Consequently, this region is considered as a source of CO_2 for the atmosphere (Goyet et al., 1998). In order to quantify the variation of fCO_2 in this area, we will determine the variation of the CO_2 absorption capacity of the ocean (Goyet et al., 1998). Data used in such studies, are usually collected during oceanographic cruises which are expensive in terms of time and money. Hence, here we also use another data source like satellite data, to cover much wider area than oceanographic cruises.

In order to compute fCO_2 , we need several parameters, such as SSS (Sea Surface Salinity) and SST (Sea Surface Temperature). Unlike other satellite parameters such as SST which are available for several years, the SSS data provided from $SMOS$ (Soil Moisture and Ocean Salinity) mission are available only since 2010. Yet the available *in situ* data are only from 2003 to 2007 and 2009. Thus it is necessary to determine SSS from other available parameters. Figure 1 illustrates the temporal variations of SSS and SST . Figure 2.a illustrates that there is an *inverse* relationship between these two parameters (when SST increases, SSS decreases and vice versa), so we chose to use the widely available SST to estimate SSS . However, due to the

wide range of latitudes (Figure 1), we have to consider the dynamically complex system of currents flows in the western tropical Atlantic Ocean (Lefèvre et al., 2014). Each cruise covers a limited area of this region. Figure 1 and Figure 2 show the difference of temperature and salinity between these areas. In order to consider this criterion, we include *Latitude* in the models. Figure 2.b illustrates the relation between *SSS* and *Latitude*. In both techniques the function can be written as follows :

$$SSS = f(Latitude, SST) \quad (1)$$

In this paper, we compare two mathematical tech-

niques to estimate *SSS* from *SST* measured by satellite : Multiple Non-linear Regression and Multi-Layer Perceptron. Two experiments are implemented. In both experiments, we start by establishing the models from a dataset which contain these three parameters, namely *Latitude*, *SST* and *SSS*. Thus, in the first experiment, models are tested with another dataset that is outside of the original observation area, this is an "*Extrapolation*". In the second experiment, the dataset used in the test is also different from the original dataset, but it is inside the observation area, this is an "*Interpolation*". We used MATLAB™ software for the implementations of these programs.

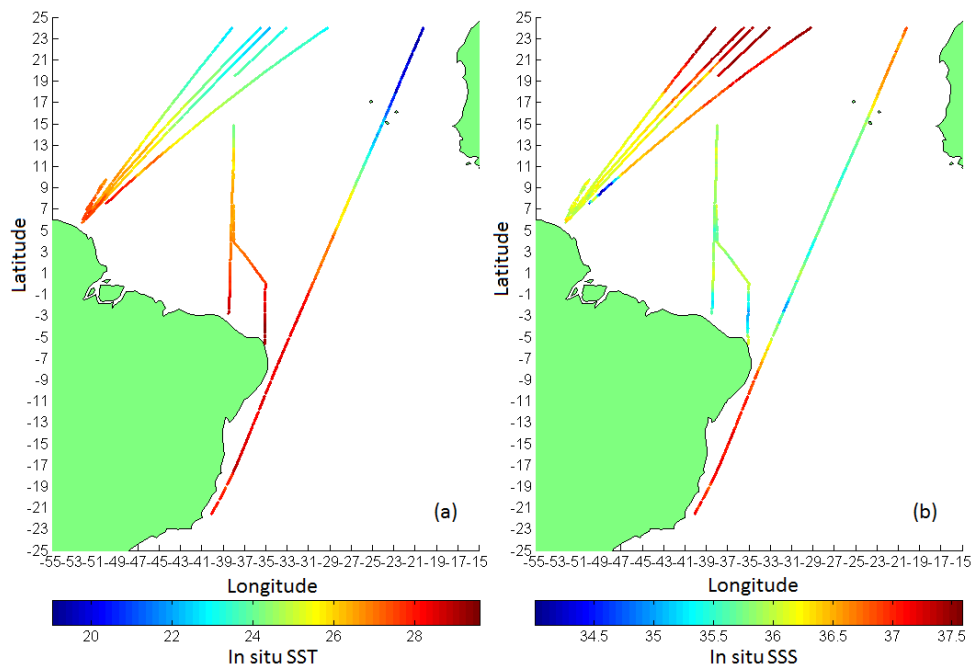


Figure 1: (a): *in situ* SST, (b): *in situ* SSS, collected during cruises : COLIBRI (western track, in 2006/2007/2009), PIRATA BRXI (central track, in 2009), Monte Olivia (eastern track, in 2009).

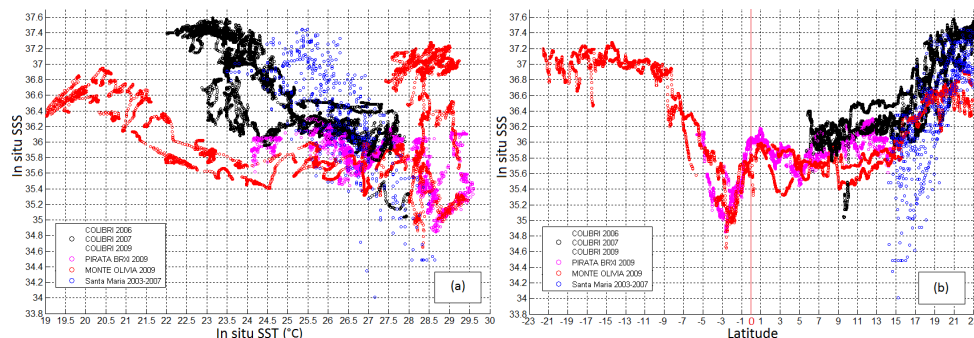


Figure 2: (a) : *in situ* SSS in terms of *in situ* SST. (b) : *in situ* SSS in terms of Latitude.

2 Datasets and methods

2.1 Datasets

This study concentrates on one period of the year from February to April. Five datasets are used. Four of them contain data collected during the following cruises:

- Santa Maria (in 2003/2004/2005/2006/2007),
- COLIBRI (in 2006/2007/2009),
- PIRATA BRXI (in 2009),
- Monte Olivia (in 2009),

which have been performed as part of the EC-funded project CARBOOCEAN IP program (<http://dataportal.carbo-ocean.org/>). These datasets

cover a large part of the Western Tropical Atlantic Ocean, with 18803 data points. The Underway fCO_2 , SST , and SSS were recorded on the research vessels. In this work, we use only SST , and SSS . The fifth dataset contains SST satellite data from MODISAqua (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer Aqua) mission (<http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/>) at 4 Km x 4 Km resolution. This satellite was launched on May 4, 2002. It passes south to north over the equator in the afternoon, and it is viewing the entire earth's surface every 1 to 2 days. Data are produced in HDF (Hierarchical Data Format) format which is the standard data format for all NASA Earth Observing System (EOS) data products. Cruises dates, tracks, and vessel names are presented in Table 1. Figure 3 shows the cruises tracks.

Cruises	Dates	Latitude Min-Max of cruises tracks	Research vessels
Santa Maria	January - 2003	14°N - 23°N	MV Santa Maria
	Jan, Feb, Mar, April - 2004		
	Feb, Mar, April - 2005		
	Jan, Feb, April - 2006		
	Feb, Mar, April - 2007		
Colibri	March - 2006	5°N - 23°N	MN Colibri
	March, April - 2007		
	Feb, Mar, April - 2009		
Monte Olivia	March, April - 2009	23°S - 23°N	Monte Olivia
PIRATA	March, April - 2009	5°S - 15°N	N.Oc. Antares

Table 1: Datasets informations : cruises dates, latitudes, and research vessels.

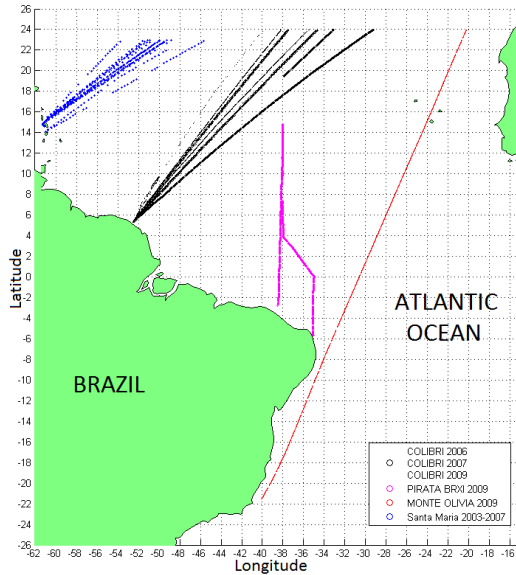


Figure 3: Cruises tracks : COLIBRI (2006/2007/2009), PIRATA BRXI (2009), Monte Olivia (2009), Santa Maria (2003/2004/2005/2006/2007).

In the first experiment, Colibri, PIRATA, and Monte Olivia data are used for building the models. MODISAqua data is used only for validation. Santa Maria data cruise is used for testing the *extrapolation*. In the second experiment, models are established using data from Santa Maria, Colibri, and Monte Olivia cruises. Validation is made using data from MODISAqua. Data from the PIRATA cruise is used for testing the *interpolation*. The origin and number of data used for each model is reported in Table 2.

2.2 MNR (Multiple Non-linear Regression) Model

A simple linear regression illustrates the relation between the dependent variable y and the independent variable x based on the regression equation (Brown, 2009):

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

The regression coefficients β_0 and β_1 , represent the *intercept* and the *slope*, respectively.

	Building models	Data points number	Test	Data points number
Experiment I	Colibri	18300	Santa Maria	503
	PIRATA Monte Olivia		MODISAqua	9139
Experiment II	Santa Maria	15668	PIRATA	3232
	Colibri Monte Olivia		MODISAqua	8247

Table 2: The origin and number of data used in the two experiments.

In our case, we have to find a relation between three variables SSS , SST , and $Latitude$. The dependent variable (SSS) is related to two independent variables (SST and $Latitude$). The linear model for k variables is:

$$\begin{aligned} y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik}, \\ i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (3)$$

Figure 2 shows that there is a non-linear relationship between (SSS , $Latitude$) and (SSS , SST). Fitting a regression plane (4) will not be representative.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 * Lat + \beta_2 * SST \quad (4)$$

We consider a quadratic surface to fit the data sets. The regression equation is:

$$\begin{aligned} y_i &= \beta_0 + \beta_1 * Lat \\ &+ \beta_2 * SST + \beta_3 * Lat^2 \\ &+ \beta_4 * Lat * SST + \beta_5 * SST^2 \end{aligned} \quad (5)$$

The Curve Fitting Toolbox in MATLAB™ provides the most widely used techniques for fitting curves and surfaces to data, using linear and non-linear regression, interpolation, and smoothing. To find the *surface* that best fits the data, we use the most popular method to estimate the regression coefficients in 5, namely the *Least Squares Method*.

2.2.1 Least Squares Method

This method is one of the oldest techniques of modern statistics. It was developed in the late 18th century and early 19th. It allows to compare experimental data, generally flawed, to a mathematical model supposed to describe this data. This method allows to minimize the experimental errors impact, by adding information in the measuring process Abdi (2010). In matrix form, the model is given by the formula:

$$y = f(X, \beta) + \epsilon \quad (6)$$

Where:

- y is an n-by-1 vector of responses.
- f is a function of β and X .
- β is a m-by-1 vector of coefficients.
- X is the n-by-m design matrix for the model.
- ϵ is an n-by-1 vector of errors.
- n is the number of data points included in fit.

The m regression coefficients are held in the vector β . To obtain this coefficient estimates, this method minimizes the summed square of residuals. The residual for the i^{th} data point r_i is defined as the deviation of the points from the regression line, in another term, it represent the difference between the observed response value y_i and the fitted response value \hat{y}_i . The Math-Works (2014a):

$$\begin{aligned} \text{Residual } r_i &= y_i - \hat{y}_i \\ y_i &\text{ observed value} \\ \hat{y}_i &\text{ fitted response} \\ S &= \sum_i^n r_i^2 = \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \end{aligned}$$

In Figure 4, we show some data points and a regression line, the plotted squares represent the squares of residuals. If we change the slope and/or the intercept of this line, the sizes of squares would be changed. The *Least Squares Method* find the line that minimizes the total area of these squares (Baker, 2010).

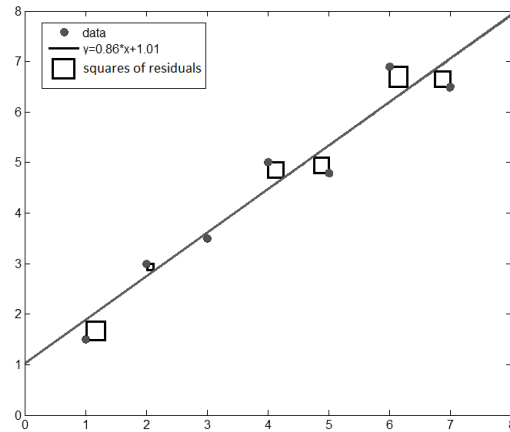


Figure 4: Representation of linear regression with the residuals squares.

We sought to compute a non-linear relationship expressing SSS as a function of $Latitude$ (Lat) and SST . We performed the multi-variable non-linear regression function which gives less errors :

$$\begin{aligned} SSS &= f(Lat, SST) = \beta_0 + \beta_1 * Lat \\ &+ \beta_2 * SST + \beta_3 * Lat^2 \\ &+ \beta_4 * Lat * SST + \beta_5 * SST^2 \end{aligned} \quad (7)$$

with

First experiment:

$$\begin{aligned}\beta_0 &= -5.855 \\ \beta_1 &= +0.5229 \\ \beta_2 &= +3.061 \\ \beta_3 &= +0.002243 \\ \beta_4 &= -0.01997 \\ \beta_5 &= -0.05623\end{aligned}$$

Second experiment:

$$\begin{aligned}\beta_0 &= -3.925 \\ \beta_1 &= +0.5998 \\ \beta_2 &= +2.828 \\ \beta_3 &= +0.001887 \\ \beta_4 &= -0.02251 \\ \beta_5 &= -0.05022\end{aligned}$$

2.3 MLP (Multi-Layer Perceptron) Model

The Artificial Neural Networks (ANNs) introduced in the 1960s, are based on the human nervous system functioning to design processing information machines (Seung, 2002). It is composed of two or more layers. Each one contains a set of neurons (e.g layers in Figure 5). The connections between the layers are associated with weights. There are many types of Neural Network (NN). They differ in structure, and the learning algorithm. In this work we proposed to apply the MLP (Multi-Layer Perceptron) that is a supervised method (Seung, 2002). It requires a desired output in order to learn using a back-propagation algorithm, for more details see Seung (2002). Model that maps the input to the output is then created. The goal is to produce an output when the desired output is unknown. Figure 5 shows the structure of MLP.

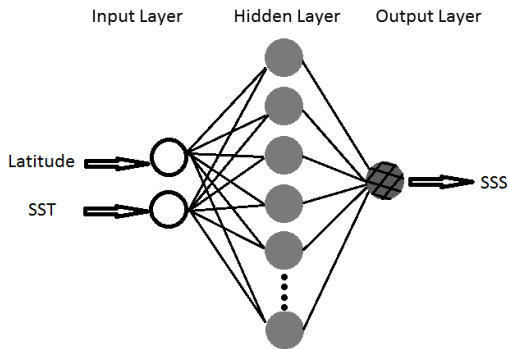


Figure 5: MLP structures obtained after data training: 2 input neurons correspond to *Latitude* and *SST*, 1 hidden layer (with 48 neurons in first experiment and 83 neurons in the second one), and 1 output neuron corresponds to estimated *SSS*.

The standard MLP network that is used for function fitting in the Neural Network Toolbox of MATLABTM, is a two-layer feedforward network, with a sigmoid transfer function (Equation (9)) in the hidden layer

and a linear transfer function (Equation (10)) in the output layer (The MathWorks, 2014b). Before learning starts, the default dataset division is made as follow:

- 70% for training,
- 15% to validate that the network is generalizing,
- 15% used as a completely independent test of network generalization.

$$net_j = \sum w_{ij} * I_i \quad (8)$$

$$f(net_j) = \frac{1}{1 - e^{-net_j}} \quad (9)$$

$$O_j = f(net_j) \quad (10)$$

I is the input vector which contains *Latitude* and *SST*. O is the output vector that represents *SSS*. w_{ij} is the weight from input i to neuron j .

In the algorithm, we propose, initially the hidden layer contained one neuron, at each new iteration a new NN is created, on which one hidden neuron is added. Finally there are as many networks as iterations. In order to find the NN that gives a best performance, we compute MSE (Equation(13)) for each one. In the first experiment, the NN with 48 hidden neurons was the best one, while it is the NN with 83 hidden neurons in the second experiment.

2.4 Models evaluation

Willmott and Matsuura (2005) have suggested that RMSE (Root Mean Square Error) is an inappropriate and misinterpreted measure of average error, and that MAE (Mean Absolute Error) is a more natural measure. (Chai and Draxler, 2014) have demonstrated that the RMSE is not ambiguous in its meaning, and is more appropriate to use than the MAE when model errors follow a normal distribution.

In model evaluation studies, there are three rules which are regularly employed to measure the average magnitude of the error.

- RMSE: As shown in Equation (11), using this quadratic scoring rule, since the errors are squared before they are averaged, the RMSE gives a relatively high weight to large errors. Thus, this rule is most useful when large errors are particularly undesirable Chai and Draxler (2014).

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_i (x_i - y_i)^2}{n}} \quad (11)$$

- MAE: This is a linear score which means that all individual differences are weighted equally in the average [5].

$$MAE = \frac{\sum_i |x_i - y_i|}{n} \quad (12)$$

- MSE: We look that MSE (Mean Square Error) is analogue to RMSE Chai and Draxler (2014).

$$MSE = \frac{\sum_i (x_i - y_i)^2}{n} \quad (13)$$

- MBE: (Mean Bias Error) Here, the signs of the errors are not removed.

$$MBE = \frac{\sum_i (x_i - y_i)}{n} \quad (14)$$

Where n is the number of data, y is the output of the model and x is the target.

3 Results and discussion

To evaluate the goodness of fit test, in both experiments, for each technique, SS was calculated at the *in*

situ SST and compared with the *in situ SSS* data. In the first experiment, Figure 6.a and Figure 6.b show fitted SSS by the MNR and the MLP, respectively, as function of *in situ SSS*. Figure 7.a and Figure 7.b show results of the second experiment. We note that in all figures which represent estimated SSS as function of *in situ SSS*, two lines are represented, the theoretical line " $y = x$ ", and the regression line " $y = a.x + b$ " that represents the relationship between this two parameters. The MBE, the RMSE, and the MAE of models are reported in Table 3. In building models, for both experiments, MLP gives smaller errors than MNR.

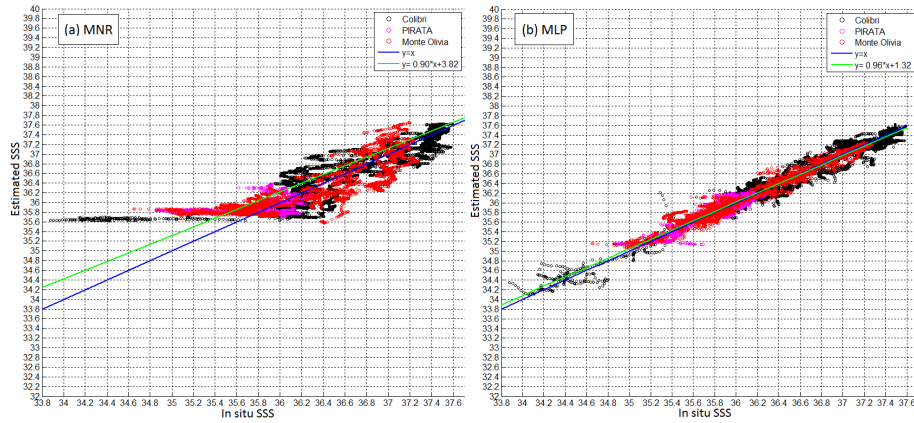


Figure 6: Experiment I (for *extrapolation*): evaluation of MNR (a) and MLP (b) using the *in situ* data; SSS estimated as function of *in situ SST*.

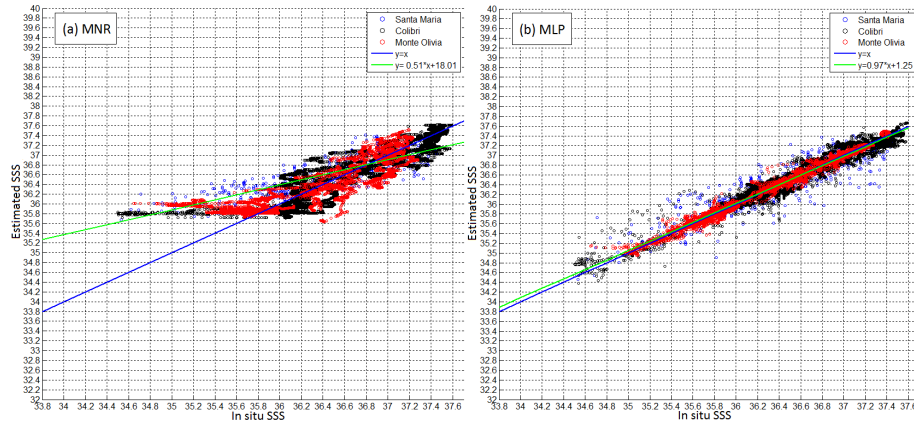
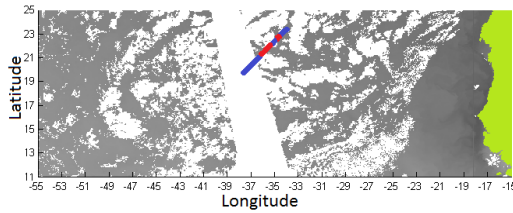


Figure 7: Experiment II (for *interpolation*): evaluation of MNR (a) and MLP (b) using the *in situ* data; SSS estimated as function of *in situ SST*.

Experiments	Models	MBE	RMSE	MAE	
I	a	MNR	4.2598×10^{-15}	0.3051	0.2306
	b	MLP	-9.3441×10^{-4}	0.1206	0.0900
II	a	MNR	-4.9171×10^{-13}	0.2844	0.2144
	b	MLP	-0.0290	0.1894	0.1177

Table 3: Goodness of fit for each model using *in situ* data : (I) first experiment, and (II) second experiment.

Experiment	MBE	RMSE	MAE
I	0.4464	0.7477	0.5271
II	0.4289	0.7533	0.5150

Table 4: Satellite SST residuals (compared to *in situ* SST) in both experiments.Figure 8: One day averaged Satellite SST data (gray scale); *in situ* SST data (blue); *in situ* SST data and satellite SST data (red).

In order to assess which approach would best estimate *SSS*, we used the remaining data subsets (Table 2). To validate the two models, we used daily averaged satellite data (from MODISAqua mission) at the dates of the *in situ* data used to build the models. Figure 8 shows an example of one day of satellite *SST* as well as the measured *in situ* data of *SST*. To extract data we need, we sought satellite points corresponding to *in situ* points and containing *SST* information. Then, we use points that include both *in situ SST* and satellite *SST* (Figure 8 in red). Several parameters, such as cloud cover (Figure 8 in white) prevent satellite observations, hence decrease of data point number that we can use from 18300 (*in situ* data) to 9139 (with satellite data) in the first experiment, and from 15668 to 8247 in the second one (Figure 8 in blue represents points with only *in situ SST* data). We used both polynomial functions and neural networks to estimate *SSS* from these satellite data. Estimated *SSS* is then compared with *in situ SSS* used in building the models.

After this first step of validation, the models are tested with data points which are situated in a different geographical area. In the first experiment, we use data from the Santa Maria cruise. In the second experiment, we use data from the PIRATA cruise. Because of the use of a dataset which is in another geographical area,

errors have increased compared to the validation step. RMSE of satellite *SST* (Table 4), show that in datasets validation, there are some satellite points with a large error in *SST*, which leads to large errors with the MLP method.

3.1 Estimation of SSS using MNR

Results of the first step of validation are reported in Table 5.I.1.a for the first experiment, and Table 5.II.3.a for the second one. Comparing these results with those of Table 3, we note that in the two experiments, errors have improved. This is because the validation dataset is in the same geographical area than the original data, and the number of data points is smaller than that of construction model.

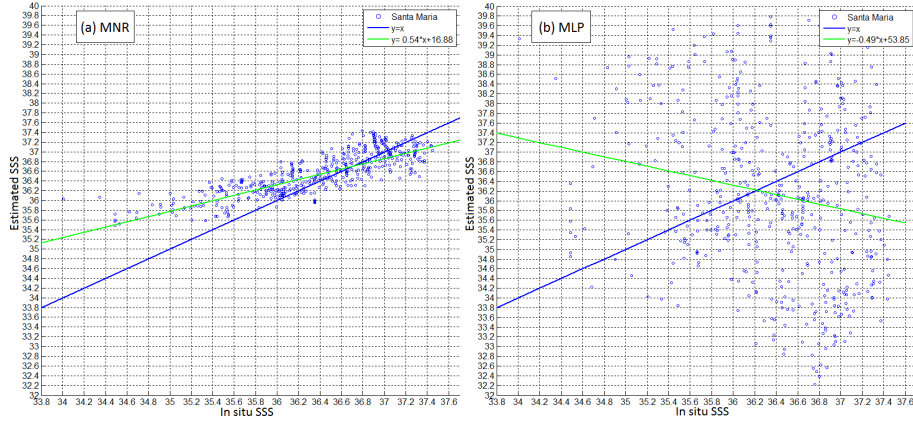
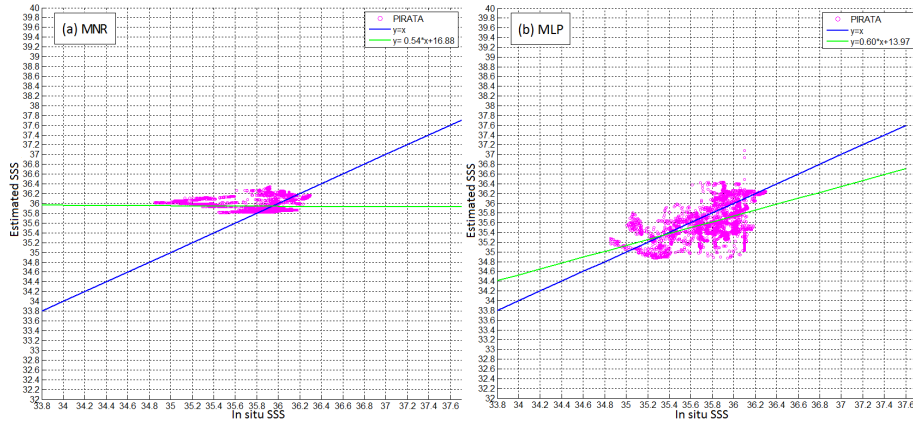
Table 5.I.2.a contains results of the *extrapolation*. In Figure 9.a, we see that the MNR agree relatively well on estimating salinity. Table 5.II.4.a shows that *interpolation* results are better than those of *extrapolation*. However, Figure 10.a shows a large margin between the theoretical and the regression lines. If we compare this fit with the MLP one (Figure 10.b), we see that the MLP fit is better, which is contradictory with the values of errors (Table 5.II.4.a and Table 5.II.4.b). For this reason, we computed the histogram of errors. As shown in Figure 11, in *interpolation* with MNR we have 67.98% of errors between $[0 - 0.2]$, and 32.02% between $]0.2 - 1.2]$. Unlike *interpolation* with MLP, we have 35.18% in $[0 - 0.2]$, and 64.82% in $]0.2 - 1.2]$.

We note that in all MNR regression (construction of models and tests), the model tends towards to overestimate *SSS* at the lowest *in situ SSS*.

3.2 Estimation of SSS using MLP

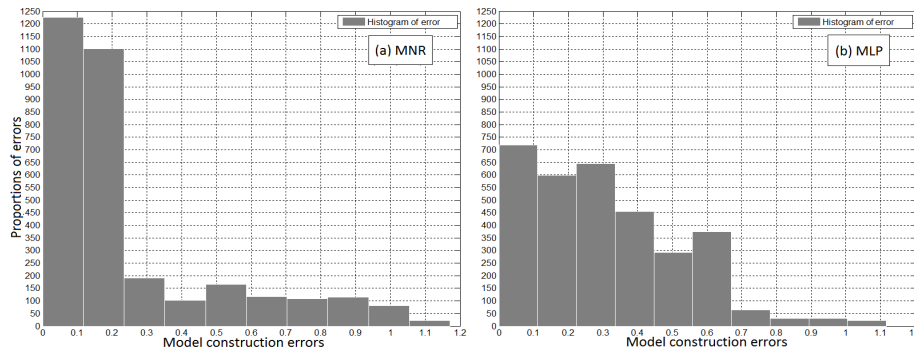
Table 5.I.1.b and Table 5.II.3.b show results of the first validation step. Unlike MNR, MLP is sensitive to large errors. For both experiments, we note that due to the large errors in satellite *SST*, validation errors are large compared to errors in building model.

The large errors in *extrapolation* results (Table 5.I.2.b, Figure 9.b), show that in spite of small errors in building model (Table 3.II.b), and in spite of an excellent regression (Figure 6.b), it is not adapted at all for *extrapolation*. However, for an *interpolation*, it can provide reasonable results (see Table 5.II.4.b and Figure 10.b).

Figure 9: *Extrapolation* results with Santa Maria data cruises in experiment I; (a): MNR, (b): MLP.Figure 10: *Interpolation* results with PIRATA data cruise in experiment II; (a): MNR, (b): MLP.

Experiments	Datasets		Models	MBE	RMSE	MAE
I	1	Satellite data (MODISAqua)	a MNR	0.0901	0.2522	0.1965
			b MLP	-0.1785	0.5810	0.2700
	2	<i>in situ</i> data (Santa Maria cruises)	a MNR	-0.1871	0.4336	0.3316
			b MLP	0.2247	1.9608	1.5621
II	3	Satellite data (MODISAqua)	a MNR	0.0972	0.2674	0.2032
			b MLP	0.3389	2.3112	0.6521
	4	<i>in situ</i> data (PIRATA cruise)	a MNR	-0.1588	0.3614	0.2473
			b MLP	-0.1781	0.3775	0.3081

Table 5: Estimated residuals *SSS* with the four test datasets (1,2,3,4), and the two techniques (a: MNR, b: MLP).

Figure 11: Error histograms in *interpolation*, (a): MNR, (b): MLP.

This work shows that the MLP method needs to be significantly improved to be used to interpolate and extrapolate *SST* from *SST*. A neural network is more complicated than a polynomial function. Thus for obtaining a robust neural network, many parameters can be changed, especially the structure, for example change the number of hidden layers, the number of hidden neurones, connections between neurones... The training algorithm could also be changed. This study further indicates that the popular Non-linear Regression with Least Squares method provides better results than MLP in this area and for this parameters (*SST*, *SSS*). The MNR equation:

$$\begin{aligned} SSS &= f(Lat, SST) = \beta_0 + \beta_1 * Lat \\ &+ \beta_2 * SST + \beta_3 * Lat^2 \\ &+ \beta_4 * Lat * SST + \beta_5 * SST^2 \end{aligned} \quad (15)$$

is an admissible solution whether it is for *extrapolation* with $RMSE = 0.3$, within 23°S - 61°W to 23°N - 20°W :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= -5.855 \\ \beta_1 &= +0.5229 \\ \beta_2 &= +3.061 \\ \beta_3 &= +0.002243 \\ \beta_4 &= -0.01997 \\ \beta_5 &= -0.05623 \end{aligned}$$

Or for *interpolation* with $RMSE = 0.2$, within 23°S - 55°W to 23°N - 20°W :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= -3.925 \\ \beta_1 &= +0.5998 \\ \beta_2 &= +2.828 \\ \beta_3 &= +0.001887 \\ \beta_4 &= -0.02251 \\ \beta_5 &= -0.05022 \end{aligned}$$

At present, additional datasets are required to better assess the model. We propose to perform a model for each month, or for each season of the year (Fall: September-October-November, Winter: December-January-February, Spring: March-April-May, Summer: June-July-August) depending upon the availability of *in situ* data. A threshold could be used

to exclude the wrong satellite *SST*. Overall, this study opens the route of mapping *SSS* at the same temporal and spatial resolution as *SST* from satellites.

Acknowledgements

We are grateful to the MESRS (Ministère Algérien de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique) for funding H.MOUSSA's PhD.

References

- Abdi, H. (2010). The Method of Least Squares. In *Encyclopedia of Research Design*, pages 705–708.
- Baker, S. (2010). Simple Regression Theory I.
- Brown, S. (2009). Multiple Linear Regression Analysis: A Matrix Approach with MATLAB. *ALABAMA JOURNAL OF MATHEMATICS*.
- Chai, T. and Draxler, R. R. (2014). Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? – Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geosci. Model Dev.*, 7(3):1247–1250.
- Goyet, C., Adams, R., and Eiseheid, G. (1998). Observations of the CO₂ system properties in the tropical Atlantic Ocean. *Marine Chemistry*, 60(1–2):49–61.
- Lefèvre, N., Urbano, D. F., Gallois, F., and Diverrès, D. (2014). Impact of physical processes on the seasonal distribution of the fugacity of CO₂ in the western tropical Atlantic: FCO₂ IN THE WESTERN TROPICAL ATLANTIC. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 119(2):646–663.
- Seung, S. (2002). Multilayer perceptrons and backpropagation learning.
- The MathWorks (2014a). *Curve Fitting Toolbox User's Guide*.
- The MathWorks (2014b). *Neural Network Toolbox User's Guide*.
- Willmott, C. J. and Matsuura, K. (2005). Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *Climate research*, 30(1):79.

A.2.2 Satellite-derived CO₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic ocean using feedforward neural network

- **Journal** : International Journal of Remote Sensing.
- **Date de publication** : 21 Jan 2016.
- **DOI** : 10.1080/01431161.2015.1131872.
- **Résumé** : Un réseau de neurones est utilisé pour quantifier la fugacité de CO₂ dans les eaux de surface ($f\text{CO}_2^{\text{eau}}$) de l’océan Atlantique tropical, exclusivement à partir de données satellitaires : température des eaux de surface, salinité des eaux de surface et de chlorophylle-a (CHL-a), à une résolution de spatiale de 4 km × 4 km, pour la période du printemps (Mars et Avril). Le modèle a été construit en utilisant 7188 données *in situ* fournies par *The Surface Ocean CO₂ Atlas*(SOCAT), et les produits du *EC-funded project CARBOOCEAN IP program* ; disponibles pour les années 2001, 2002, 2004, 2006, 2007, et 2009. Le modèle a été testé à l’aide de données satellitaires du *Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer Aqua*(MODIS Aqua). Cette approche a été validée sur la zone allant de 8°N-61°W à 23°N-20°W. Une comparaison avec la régression linéaire multiple a été établie. Le réseau de neurones a fourni de meilleurs résultats (erreur quadratique moyenne (RMSE) de 8,7 μatm (0,881 Pa)) que la régression linéaire (RMSE de 9,6 μatm (0,973 Pa)) pour l’interpolation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ en utilisant des données satellitaires. Cette approche pourrait être appliquée à l’ensemble de l’océan Atlantique tropical et pour les saisons restantes (été, automne, et hiver) dès lors que les données d’entrée nécessaires sont disponibles.
- **Citation** : Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., and Lefèvre, N. (2016). Satellite-derived CO₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic Ocean using a feedforward neural network . International Journal of Remote Sensing, 37(3), 580–598. doi:10.1080/01431161.2015.1131872.

Satellite-derived CO₂ fugacity in surface seawater of the tropical Atlantic ocean using a feedforward neural network

H. MOUSSA^{1,2} M.A. BENALLAL^{1,2} C. GOYET^{1,2} N. Lefèvre^{3,4}

International Journal of Remote Sensing (final draft post-refereeing)
DOI:<http://dx.doi.org/10.1080/01431161.2015.1131872>

¹IMAGES ESPACE-DEV, Université de Perpignan Via Domitia, 52 Avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan Cedex 9, France.

²ESPACE-DEV, UG UA UR UM IRD, Maison de la télédétection, 500 Rue Jean-François Breton, 34093 Montpellier Cedex 5, France.

³IRD LOCEAN, Université Pierre et Marie Curie, UMR 7159, Paris, France.

⁴Lab. Oceanografia Física Estuarina e Costeira, Universidade Federal de Pernambuco, Av. Arquitetura, Brasil.

hadjer.moussa@univ-perp.fr

Abstract

A feedforward neural network is used to quantify the fugacity of CO₂ in surface seawater ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) of the tropical Atlantic ocean, exclusively from satellite data: sea-surface temperature (SST), sea-surface salinity (SSS), and chlorophyll-*a* (chl-*a*), at a 4 km × 4 km spatial resolution, for the period of spring (March and April). The model was constructed using 7188 *in situ* data provided by the "Surface Ocean CO₂ ATLAS" (SOCAT) products, and the "EC-funded project CARBOOCEAN IP program" products, available for the years: 2001, 2002, 2004, 2006, 2007, and 2009. The model was tested using remote sensing data of the Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer (MODIS) Aqua. This approach was validated over the area extending from 8°N-61°W to 23°N-20°W. A comparison with multiple linear regression model was established. The neuron network has provided better results (root mean square error (RMSE) of 8.7 μatm (0.8815275 Pa)) than linear regression (RMSE of 9.6 μatm (0.97272 Pa)) for $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ interpolation using remote sensing data. Since the required input data are available, this approach could be applied to the whole tropical Atlantic ocean and for the remaining seasons (summer, fall, and winter).

Received 18 July 2015, accepted 07 December 2015

Key words: fugacity; temperature; salinity; chlorophyll-*a*; satellite; neural network; ocean; tropical Atlantic; MODIS; SeaWiFS.

1 Introduction

Anthropogenic activities are responsible for much of the increase of the second major greenhouse gas, namely, carbon dioxide. Because of emissions of anthropogenic CO₂, the atmospheric CO₂ fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$) has increased from 277 μatm (according to Bureau International Des Poids Et Mesures (1955), 1 atm = 101325 Pa) in 1750 (prior to the industrial revolution) to 395 μatm in 2013 (Dlugokencky and Tans, 2015; Tans and Keeling, 2015; Le Quéré et al., 2015). The monthly average of $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$ at the Mauna Loa station, reached 400 μatm in February 2015 (Tans and Keeling, 2015).

In contrast to the Pacific ocean (North of 50°S) which occupies 49% of the ocean area, and takes up only 18% of the global CO₂ uptake (Goyet and Peltzer, 1994, 1997), the Atlantic ocean (North of 50°S) represents 24% of the ocean area, and takes up over 40% of the global CO₂ (Chen, 1982; Takahashi et al., 1997, 2002, 2009). In particular, the tropical Atlantic region is characterized by strong dynamical processes, due to

the seasonal variations of surface currents. Thus, it is important to understand the total inorganic carbon distribution and its variability in this ocean area.

Although the tropical Atlantic ocean, especially the equatorial region, appears to be a source of CO₂ throughout the year (Takahashi, 1961; Goyet et al., 1998; Lefèvre et al., 1998; Landschützer et al., 2013), regional sinks of CO₂ have been found (Park and Wanninkhof, 2012; Schuster et al., 2013). Park and Wanninkhof (2012) have further shown that from 2002 to 2009, in the region 19°N-20°N, 65°W-68°W, seawater CO₂ fugacity ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$), is lower than $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$, which lead to a large ocean CO₂ sink of $0.06 \pm 0.18 \text{ mol m}^{-2} \text{ year}^{-1}$. According to the study of Lefèvre et al. (2014), in March/April 2009, the region between 6°S-15°N, 55°W-25°W, would be a CO₂ sink of 0.40 $\text{mmol m}^{-2} \text{ day}^{-1}$ ($0.15 \text{ mol m}^{-2} \text{ year}^{-1}$).

Although the number of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ measurements has increased greatly during the last decades (since the 1990s (Sabine et al., 2010)), it is still very difficult to evaluate the air-sea CO₂ fluxes over an ocean basin and thus over the global ocean. Finding correlation

among *in situ* measurements (sea-surface temperature (SST), sea-surface salinity (SSS), chlorophyll-*a* (chl-*a*) ...) allows us to make maps of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ where *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ data are not available, and then to estimate regional air-sea CO_2 fluxes.

The objective of this study is to elaborate a model for the tropical Atlantic ocean that best represents this correlation during spring (March and April), and then use it to map $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using satellite data (SST, SSS, chl-*a*) which have a much larger spatio-temporal coverage, and with finer resolution than *in situ* data.

In order to develop an accurate model, we need to perform several performance tests, as well as, to determine why and where residuals are increasing. That is why we first choose to validate this approach over a relatively small ocean area, prior to proceed over the whole tropical Atlantic ocean. Thus, here we describe an approach applied for the limited sub-zone: from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W .

2 Data and methods

Lefevre et al. (2005) reported that neural network techniques predict $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in the Atlantic subpolar gyre with a better accuracy than multiple regression. In many ocean areas, the two techniques: self-organizing map (SOM) and feedforward neural network (FNN), have been widely used to interpolate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (Lefevre et al., 2005; Friedrich and Oeschlies, 2009; Telszewski et al., 2009; Landschützer et al., 2013; Nakaoka et al., 2013; Zeng et al., 2014). SOM is commonly viewed as a flexible tool for data analysis, such as visualization and clustering of high dimensional data spaces (Flexer, 2001; Xu and Wunsch, 2005). It is also used for nonlinear regression and time series prediction tasks (Barreto and Araújo, 2002; Barreto, 2007). However, compared to the number of models developed based on FNN, this field is still in its infancy. Here, we chose to compare FNN algorithm with multiple linear regression model, to interpolate the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ spatio-temporal variations.

Sea-surface $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ depends upon several parameters. Changes in solubility, which is mainly driven by temperature, leads to an important spatial and temporal variation of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. In earlier works, $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SST relationships have been studied (Gordon and Jones, 1973; Copin-Montegut, 1988; Copin-montegut, 1989; Goyet and Poisson, 1989; Goyet et al., 1993), and used to map $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (Stephens et al., 1995; Lefevre and Taylor, 2002; Inoue et al., 2003; Olsen et al., 2003; Lefevre et al., 2005). The $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is also affected by marine biology that modifies the total dissolved inorganic carbon content of the water.

Jamet et al. (2007) further investigated the parameters needed to generate seasonal $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ maps in the North Atlantic. They reported that interpolating $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ as a function of SST, chl-*a* and mixed layer depth (MLD) provides results more accurate than those of previous works based only upon SST, or upon the three parameters: SST, latitude, and longitude. In this work, we chose to interpolate among parameters that have the highest influence on $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, namely;

SST, SSS, and chl-*a*.

2.1 Data

2.1.1 *in situ* data

The spatial and temporal domain of this study extends from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W (See figure 1), for a period from March to April. The database is a combination of: 1) Surface Ocean CO_2 Atlas (SOCAT) product, version 1.4 (Pfeil et al., 2013), and 2) The product of the EC-funded project CARBOOCEAN IP program (<http://dataportal.carboocean.org/>). This database is used to construct the models. It contains 7188 vectors with following parameters: date, time, latitude, longitude, $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, SST, and SSS. The ocean depth of all data is not more than 5 m. Since *in situ* chl-*a* was not available, we merged *in situ* database with satellite chl-*a* provided from 2 sensors: MODIS Aqua (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer Aqua, <http://oceansci.gsfc.nasa.gov/MODISA/>) and SeaWiFS (Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor, <http://oceansci.gsfc.nasa.gov/SeaWiFS/>) (Section 2.1.2). These *in situ* data are available for the years: 2001, 2002, 2004, 2006, 2007, and 2009. We note that unlike $f(\text{CO}_2^{\text{atm}})$, the surface $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is highly variable, yet, because of the sparsity of its spatial and temporal coverage, the interannual variability of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ remains poorly understood. That is why we combine data of 6 years to develop the model.

2.1.2 Satellite data

This database is used to create maps of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. It contains SST and chl-*a* data, which are generated from the MODIS Aqua sensor. Data are available from 2003 at $4\text{ km} \times 4\text{ km}$ resolution. In addition to these data, as mentioned above (Section 2.1.1), we used satellite chl-*a* generated from SeaWiFS, at $9\text{ km} \times 9\text{ km}$ resolution, for the years 2001 and 2002.

Knowing that, for daily averaged satellite data, there are a lot of data points missing (primarily due to cloud cover), in order to get a better spatio-temporal coverage, all satellite data used in this study are monthly averaged.

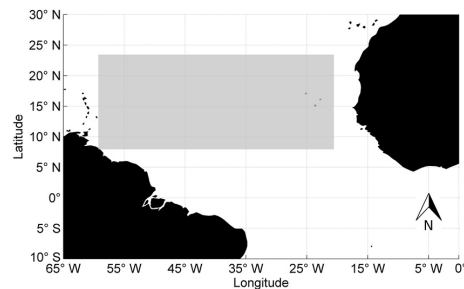


Figure 1: The study area, which is represented by the gray rectangle.

2.2 Methods

2.2.1 Feedforward neural network (FNN)

An artificial neural network (ANN) is an abstraction of biological neurons, used to solve different problems in several fields. Many researchers have worked to improve ANN computing capability (McCulloch and Pitts, 1943; Rosenblatt, 1958; Rumelhart and McClelland, 1986).

ANN consists in a set of interconnected neurons (computing units) in the form of layers, which aim to compute an output from one or more input(s) through learning. It can be used for several problems, such as linear and non-linear regressions, pattern recognition, anomaly detection... The network architecture and learning algorithm can be adapted depending on the scientific question of interest.

The number of input neurons depends on the number of estimation parameters. The precise number of hidden layers and hidden neurons needs to be set by the user, depending on the complexity of the problem. Several researchers proved that three-layer ANNs are preferred for non-linear function approximation (de Villiers and Barnard, 1993; Tamura and Tateishi, 1997). In order to define the optimal number of hidden neurons, we could repeat the ANN learning, each time increasing the number, until the best result is obtained. For a regression problem, generalization is the principal object, since too many hidden neurons may lead the ANN to overlearning resulting in increasing errors (Panchal et al., 2011), a large number of hidden neurons should be avoided. The FNN is the simplest type of ANN, in which the information circulates in one direction, from the input to the output, and there are no connections from output to input.

The learning technique we used here to train the FNN is a variant of the backpropagation algorithm (Rumelhart and McClelland, 1986) which is the most popular in FNN learning field. In order to minimize the mean squared error between the desired output and the actual output of the network, this algorithm aims to adjust connection weights, proceeding from the last to the first layer. This variant is called "levenberg-marquard backpropagation" (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963), which is one of the fast training algorithms presenting a stable convergence.

2.2.2 Multiple linear regression (MLR)

The MLR method is used to determine the coefficients ($\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$) that illustrate the relationship between a dependent variable (Y) and two or more explanatory variables (X_i). This leads to an equation of the form: $Y = \beta_0 + \beta_1 \times X_1 + \beta_2 \times X_2 + \dots + \beta_n \times X_n$, n represents the number of observations.

To do this, we used the most popular method, namely, least squares method, which aims to find the coefficients regression that best fit the observations, by minimizing the summed square of residuals. We can

define the residuals as the deviation of the points from the regression line.

3 Results and discussion

In the aim of comparing FNN with MLR, for each method we pass through 3 steps: 1) learning (model construction): using 4792 *in situ* data points, 2) validation: used to assess model's ability to estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ from another *in situ* dataset. The observations are located in the same area as the learning set (from 8°N-61°W to 23°N-20°W), and in the same time period of the year (spring). This set contains 2396 points, and 3) test: using satellite data, this step represents the most robust test of model's capacity to estimate basin wide $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. It consists in computing $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ exclusively from satellite data, after that, comparing results with *in situ* data.

3.1 Models construction

In order to avoid overfitting, *in situ* data was separated into 2 subsets, one for model construction, and the other one for validation. The separation was done in such a way that the learning set, as well as the validation set cover the whole $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ interval.

The FNN which is used for the comparison, was chosen among 9 networks, with a hidden neuron number ranging from 2 to 10 (since a neuron network with one hidden neuron is similar to linear regression). The FNN with 6 hidden neurons gave the best results, with a root mean square error (RMSE) of 8.7 μatm in the test step (Table 1). Furthermore, the multiple linear equation which was developed for this comparison is:

$$\begin{aligned} f(\text{SST}, \text{SSS}, \text{chl-}a) &= \beta_0 + \beta_1 \times (\text{SST}) \\ &+ \beta_2 \times (\text{SSS}) \\ &+ \beta_3 \times (\text{chl-}a) \end{aligned} \quad (1)$$

With: $\beta_0 = +180.47$, $\beta_1 = -1.89$, $\beta_2 = +6.61$, $\beta_3 = +26.50$

Errors of learning, validation and test are presented in Table 1. We note that FNN with 6 hidden neurons provided good RMSE values compared to linear regression. To better see the difference between these two models, we present in figures 2, 3, and 4, the results of the three steps cited above. It is clear in figures 2 and 3, that in learning and validation, the slope and the intercept are good using FNN. Furthermore, the coefficient of determination (R^2) is high using FNN (it reaches 70% , versus 53% using MLR). We note also that in the three figures, data presented with triangles, are data for the day 16 April 2009 which contains most of the high errors (reasons are explained in the end of this section) in the three steps, as we can see, for this day, there are more data misfitted in (b) than in (a). Thus, we chose to use the neural network with 6 hidden neurons to interpolate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$.

Hidden neuron number	Learning		Validation		Test	
	RMSE (μatm)	Bias (μatm)	RMSE (μatm)	Bias (μatm)	RMSE (μatm)	Bias (μatm)
2	9.09	0.25	9.08	0.23	8.91	1.24
3	8.64	0.01	8.66	-0.05	10.07	1.07
4	8.38	0.01	8.41	-0.05	9.75	1.70
5	7.88	-0.05	7.91	-0.10	10.74	1.23
6	7.75	0.03	7.77	0.04	8.72	0.51
7	7.94	-0.01	7.94	-0.04	9.97	2.08
8	6.79	0.15	6.83	0.10	11.12	2.04
9	6.55	0.01	6.56	-0.03	10.02	2.53
10	5.74	0.14	5.79	0.12	11.12	1.73
Linear regression	9.42	approx. 0.00	9.41	-0.03	9.63	0.82

Table 1: Results of learning, validation and test of the 9 neural networks, as well as linear regression. The best RMSE ($8.72 \mu\text{atm}$) corresponds to the FNN with 6 hidden neurons (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W).

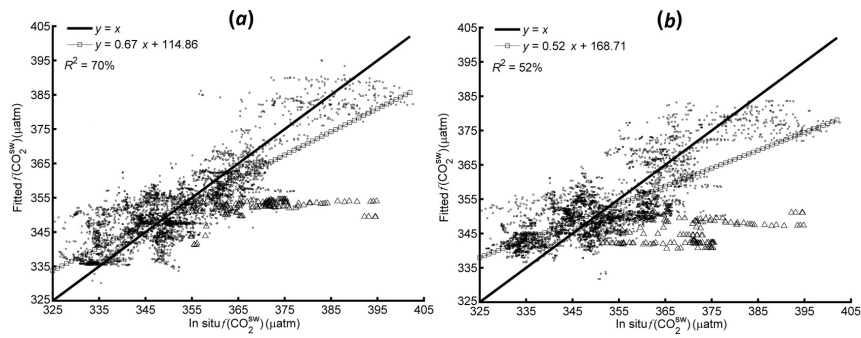


Figure 2: Result of models construction. Fitted $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ as function of *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W). (a): FNN with 6 hidden neurons, and (b): linear regression. Triangle points represent data for the day 16 April 2009.

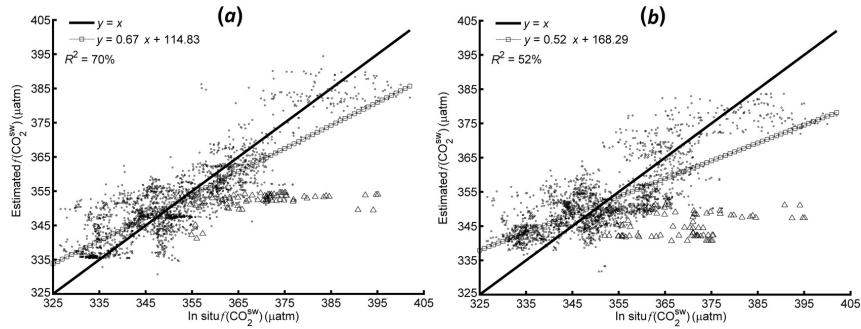


Figure 3: Result of models validation. Estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ as function of *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W). (a): FNN with 6 hidden neurons, and (b): linear regression. Triangle points represent data for the day 16 April 2009.

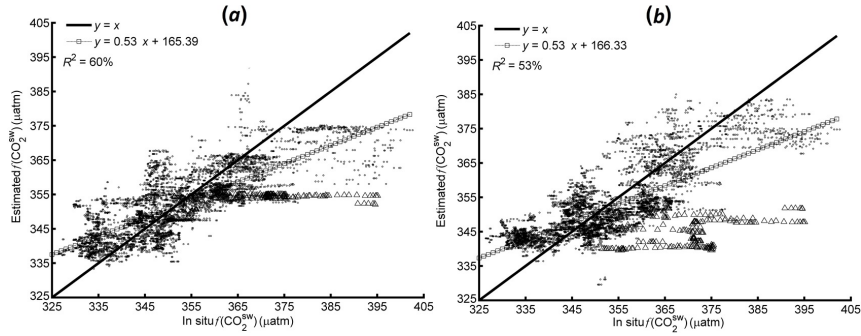


Figure 4: Result of models test. Estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ as function of *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W). (a): FNN with 6 hidden neurons, and (b): linear regression. Triangle points represent data for the day 16 April 2009.

The FNN configuration is as follow: Three input neurons, corresponding to the three parameters: SST, SSS, and chl-*a*, 6 hidden neurons, and one output neuron for $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. The model is valid for the following intervals: SST: $[19^\circ\text{C} - 25^\circ\text{C}]$, SSS: $[34.0 - 37.6]$, chl-*a*: $[0.01 \text{ mg m}^{-3} - 1.12 \text{ mg m}^{-3}]$, and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$: $[325$

$\mu\text{atm} - 403 \mu\text{atm}]$. chl-*a* measurements have a particularly skewed distribution, in order to make it less skewed, we apply the \log_{10} transformation. The RMSE between *in situ* and fitted $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in learning step is of $7.8 \mu\text{atm}$ with a tiny bias ($0.03 \mu\text{atm}$) (Figure 2, Table 2).

Years	Months	RMSE (μatm)	Bias (μatm)	Number of data points
2001	April	9.95	-7.13	184
2002	March	13.23	-12.45	62
2004	March	6.61	3.10	364
2006	March	5.28	-3.54	591
2007	March	6.54	-3.63	358
	April	5.52	3.41	847
2009	March	7.38	-1.81	1746
	April	11.90	7.46	640
Total		7.75	0.03	4792

Table 2: Comparison between *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and fitted $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in the FNN learning step (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W).

The largest residuals ($> 20 \mu\text{atm}$) are located between the longitudes 29°W and 20°W . In this band, the correlation coefficient between $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and estimation parameters (SST, SSS, and chl-*a*) are as follow: $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SST: -0.6 , $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SSS: 0.4 and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -chl-*a*: 0.6 . Since the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SSS correlation is low, we present in figure 5 the associated residuals of *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and: SST in (a) and chl-*a* in (b). We note that the highest residuals (red squares) correspond to points in which the relationship between the 2 parameters ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and SST/chl-*a*) is different from the general trend. As presented in Table 3, for $\text{SST} \geq 22.5^\circ\text{C}$ and $\text{chl-}a \leq 0.15 \text{ mg m}^{-3}$, most of the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ values (97%) are $\leq 371 \mu\text{atm}$. This is not the case of data for the red squares in figure 5; this may be one of the reasons why the residual increases.

We see in Table 2 that there are 2 months in which RMSE is large: March 2002 and April 2009. In March

2002, residual values are between $15 \mu\text{atm}$ and $26 \mu\text{atm}$. In this month, half of the set contains data with low density (according to $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ values of all training data set); 40% of the points have $f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \leq 333 \mu\text{atm}$. As shown in figure 6, there are 238 data points with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \leq 333 \mu\text{atm}$, which represent only 5% of all training data set.

	$f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \leq 371$	$f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \geq 371$
Proportion of data (%)*	97	3
Minimum residual (μatm)	0.0	19.7
Maximum residual (μatm)	26.4	47.3

Table 3: Minimum and maximum residuals according to SST, chl-*a*, and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ values (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W). *Percentage relative to data with $\text{SST} \geq 22.5^\circ\text{C}$ and $\text{chl-}a \leq 0.15 \text{ mg m}^{-3}$.

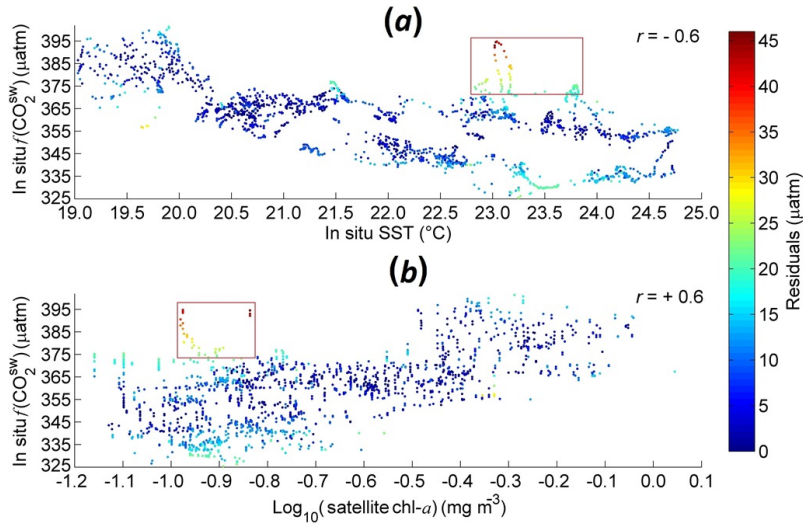


Figure 5: Residuals of FNN learning step as function of: (a): $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SST relationship, and (b): $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -chl- a relationship (from 8°N - 29°W to 23°N - 20°W).

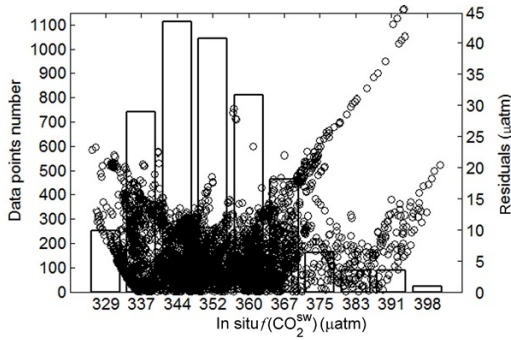


Figure 6: Relationship between $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ density (in learning) data set) and residual values (of learning step) (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W).

Unlike March 2002, in April 2009, data points with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \geq 371 \mu\text{atm}$ represent 19% of all data in this month, but for most of these points, the residual values are very large, reaching $47 \mu\text{atm}$. Figure 6 shows that data points with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}}) \geq 371 \mu\text{atm}$ represent 8% (392 points) of all training data set. But this low density is not the only cause of these large residuals. Figure 7 shows all the data for April 2009. We can see that there is one day in which residuals are large: 16 April 2009. At the bottom of this figure (figure 7 (b)), we see that when $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variability is high, residuals are high (day (i): 16 April 2009), and decrease when $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variability is low (day (ii): 17 April 2009, and day (iii): 18 April 2009).

There are 160 data points for 16 April 2009, in a duration of 10 hours, with a time difference of between 2 to 10 minutes between 2 successive points. Yet, there is a difference of $43 \mu\text{atm}$ between maximum and minimum of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ for this day (Table 4). Other parameters (SST, SSS, and chl- a) have low vari-

ation comparing to $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, we see in Table 4 that SST (that most affect $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$) represents a difference of 1.8°C between maximum and minimum value. We conclude that there is another process causing this high variability. There are several current systems in the tropical Atlantic ocean that affect the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ distribution. In boreal spring, South of 20°N , the wind field off the North African coast is Southward, leading to the African Coastal Current, and local upwelling (Stramma and Schott, 1999; Mittelstaedt, 1983). We note that data points of 16 April 2009 (figure 7) are close to an upwelling zone (Stramma and Schott, 1999; Mittelstaedt, 1983). That could be the reason of high $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variability.

Parameter	Minimum	Maximum	Range (Max-Min)
$f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ (μatm)	351	394	43
SST ($^\circ\text{C}$)	23.0	24.8	1.8
SSS	35.67	35.89	0.23
chl- a (mg m^{-3})	0.07	0.15	0.08
Latitude	9	13	4
Longitude	-27	-25	2

Table 4: Maximum and minimum of each parameter for 16 April 2009.

3.2 The FNN validation step

The comparison between *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ observations and estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is presented in figure 3 (a). The validation set is approximately the same as the learning one, and we note that in figure 3 (a) the trend is close to that in learning step (figure 2 (a), Section 3.1) with almost the same slope (S) and intercept (I) (Learning: $S=0.67$, $I=114.86$; Validation: $S=0.67$, $I=114.83$), thus we can say that the FNN has achieved the validation step, and it is capable of pro-

ducing $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ from a different *in situ* dataset. Table 5 shows that residual values of each year are close to residuals of the learning step (Table 2) and RMSE increases in March 2002 and April 2009 for the same reasons (the low density of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ values, and the high $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variability caused by a local upwelling).

In both learning and validation steps, we note in

Table 2 and Table 5 that bias tends to be larger in early years. This could be caused by the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ trend, which increased of about $30 \mu\text{atm}$ between the years 2001 and 2009, and by the FNN trained to fit densely sampled year 2009 (see "Number of data points" in Table 2 and Table 5).

Years	Months	RMSE (μatm)	Bias (μatm)	Number of data points
2001	April	10.04	-7.12	91
2002	March	13.12	-12.30	32
2004	March	6.79	3.32	182
2006	March	5.26	-3.49	295
2007	March	6.46	-3.72	179
	April	5.53	3.42	423
2009	March	7.39	-1.83	873
	April	11.90	7.40	321
Total		7.77	0.04	2396

Table 5: Comparison between *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in the FNN validation step (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W).

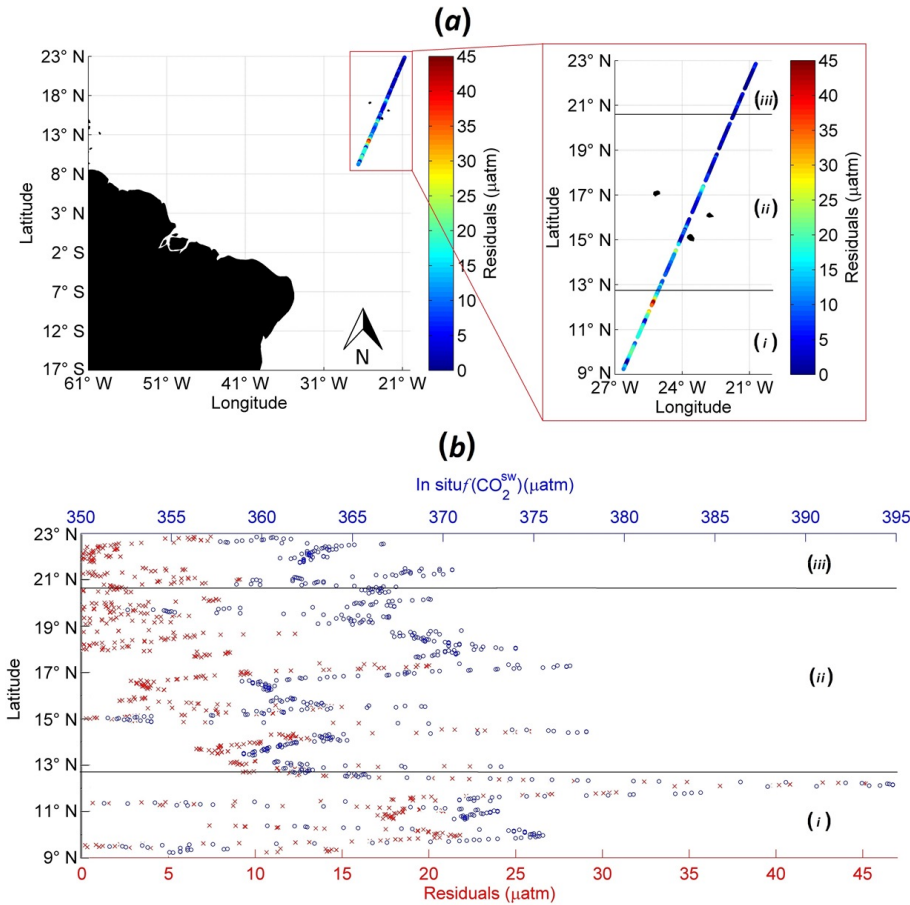


Figure 7: April 2009; (a): Residuals of learning step as function of days and geographical position. (b): Residuals of learning step as function of days, $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variations and latitude. (i): 16 April 2009, 13h02 to 23h57. (ii): 17 April 2009, 00h02 to 23h57. (iii): 18 April 2009, 00h00 to 10h40.

3.3 Test of the FNN with satellite data

In order to obtain monthly $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map with 4 km \times 4 km resolution, we used data provided from MODIS Aqua (<http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/MODISA/Mapped/Monthly/4km/>) which are available since July 2002. Thus, to make a comparison with *in situ* data and then to compute residuals, we used satellite data for the years: 2004, 2006, 2007 and 2009. FNN should estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ from satellite SST, satellite SSS, and satellite chl-*a* with good accuracy. Since satellite SSS is available only since 2010 (provided by SMOS (Soil Moisture and Ocean Salinity) and Aquarius/SAC-D) at \sim 100-300 km spatial resolution with uncertainty around 0.3 in the Tropics (Lagerloef et al., 2008; Reul et al., 2012), we follow the approach used in Moussa et al. (2015) and Benallal et al. (2015) to get interpolated SSS data from satellite SST and latitude (Lat). We performed a model with all *in situ* data we dispose (7188 points). We determined the following equation:

$$\begin{aligned} f(\text{SST}, \text{Lat}) &= \beta_0 + \beta_1 \times (\text{SST}) \\ &+ \beta_2 \times (\text{Lat}) + \beta_3 \times (\text{SST}) \\ &\times (\text{Lat}) + \beta_4 \times (\text{SST})^2 + \beta_5 \times (\text{Lat})^2 \end{aligned} \quad (2)$$

With 4 km \times 4 km spatial resolution, RMSE = 0.2 and bias = 0.02, within 8°N-61°W to 23°N-20°W:

$$\beta_0 = +61.91, \beta_1 = -1.92, \beta_2 = -0.7262, \beta_3 = +0.0305, \beta_4 = +0.03312, \beta_5 = +0.005104.$$

Then, we computed interpolated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. In order to allow comparison between *in situ* and interpolated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, we took all points in which we have both *in situ* and satellite data (6819 points). Results are presented in figure 4 (a) and Table 6. We note that, except RMSE of March 2007 which increased by 4 μatm , and RMSE of March 2009 by 2 μatm , RMSE of the remaining months are close to those of learning step (Table 2; Section 3.1) and those of validation step (Table 5; Section 3.2). This shows that model is capable of providing interpolated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ exclusively from satellite data with a low RMSE (8.7 μatm).

Years	Months	RMSE (μatm)	Bias (μatm)	Number of data points
2004	March	5.91	-0.21	546
2006	March	5.97	-3.65	886
2007	March	10.68	-8.78	537
	April	5.96	4.15	1270
2009	March	9.57	-0.20	2619
	April	11.29	7.09	961
Total		8.72	0.51	6819

Table 6: Comparison between *in situ* $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and estimated $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in the FNN test step (from 8°N-61°W to 23°N-20°W).

Although the biases of satellite SST and interpolated SSS are insignificant (-0.02 °C and 0.02, respectively), we tried to correct them, however, the improvement of the RMSE value of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ interpolation was slight (an improvement of 0.02 μatm). Moreover, since the main objective of the paper is to map $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ using satellite data, without having *in situ* data to correct them, it would be better not to correct these biases.

We represent in figure 8 an example of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ mapping for March, and April 2009, using satellite SST, interpolated SSS, and satellite chl-*a*. The resolution is of 4 km \times 4 km. Since the model was developed for data points with SST within the interval [19 °C—25 °C], points not belonging to this interval are presented in white in figure 8.

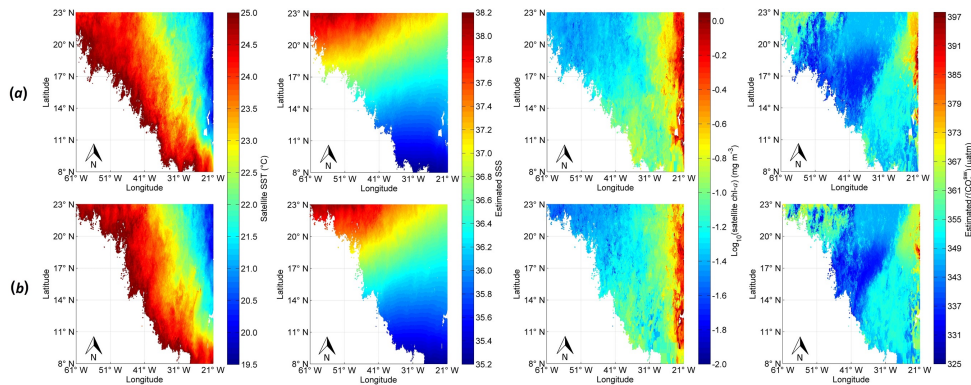


Figure 8: Mapped $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ of spring 2009, with resolution of 4 km \times 4 km, using satellite SST, interpolated SSS, and satellite chl-*a*. (a): March 2009, and (b): April 2009 (from 8°N-61°W to 23°N-20°W).

We see in this figure, that $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ increases Eastward, from $325 \mu\text{atm}$ to $397 \mu\text{atm}$. For the 2 months (March and April), West of 35°W , we note an increase of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ Northward. These variations are associated with those of SST, SSS, and chl-*a*. We note that SST increases Westward from 19.7°C to 24.8°C , SSS increases Northward from 35.2 to 38.0, and chl-*a* increases Eastward from 0.003 mg m^{-3} to 1.1 mg m^{-3} . Since the spatial variation of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is non-linear, for each parameter (SST, SSS, and chl-*a*) it is difficult to determine where the correlation with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is high. Yet, for both months, East of 35°W , $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ variations are mainly influenced by those of SST and chl-*a*, for both parameters, correlation with $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ is high; -0.6 and 0.8 respectively (in contrast to that between $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and SSS, which is of 0.1 East of 35°W). However, West of 35°W , the variations of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ are mostly affected by SSS. The correlation between these two parameters ($f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ and SSS) is high; 0.6 (unlike $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -SST and $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ -chl-*a* correlations, which are of 0.2 and -0.2 respectively). Therefore, each of the three parameters (SST, SSS, and chl-*a*) affect significantly $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$.

In order to present an example of comparison with the climatology of Takahashi et al. (2014) developed using *in situ* measurements, we produced $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map for March 2005, based upon satellite data. In figure 9, we present in (a) the climatology of Takahashi et al. (2014) for March 2005, and in (b) the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map produced here using the FNN, presented in the same $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ color scale as in (a). Furthermore, in order to see the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ distribution more clearly, we present in (c) the same map as shown in (b) with a different $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ color scale. We note that for the 2 products, the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ increase Eastward from $339 \mu\text{atm}$ to $377 \mu\text{atm}$ in (a), and from $323 \mu\text{atm}$ to $376 \mu\text{atm}$ in (b). There is almost the same $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ range in these 2 products with a difference of resolution; the Takahashi et al. (2014) map has a spatial resolution of $4^\circ \times 5^\circ$, yet, the FNN produces a $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map with a higher resolution: $0.04^\circ \times 0.04^\circ$.

In order to best represent the differences between these two products, we show in figure 10 (a) the climatological $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ of Takahashi et al. (2014) on the color scale of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ produced by FNN. Moreover, we present in figure 10 (b) the FNN product with a reduced resolution, performed by computing the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ mean of each bloc of 4° latitude \times 5° longitude, therefore, the scale of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ produced by FNN was of [323 μatm -357 μatm]. Figure 10 (c) presents the difference between the two products, the maximum difference value is of 38 μatm . We note that large differences are located in West of 36°W , where climatological $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ are overestimated compared with FNN $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$.

Overall, these results suggest that in this ocean area, the climatological estimates (Takahashi et al., 2014) would tend to overestimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ by a mean of 12 μatm over this ocean area. Since figure 9 (b) presents a higher resolution than figure 9 (a), it is now possible to detect gradual changes in $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$.

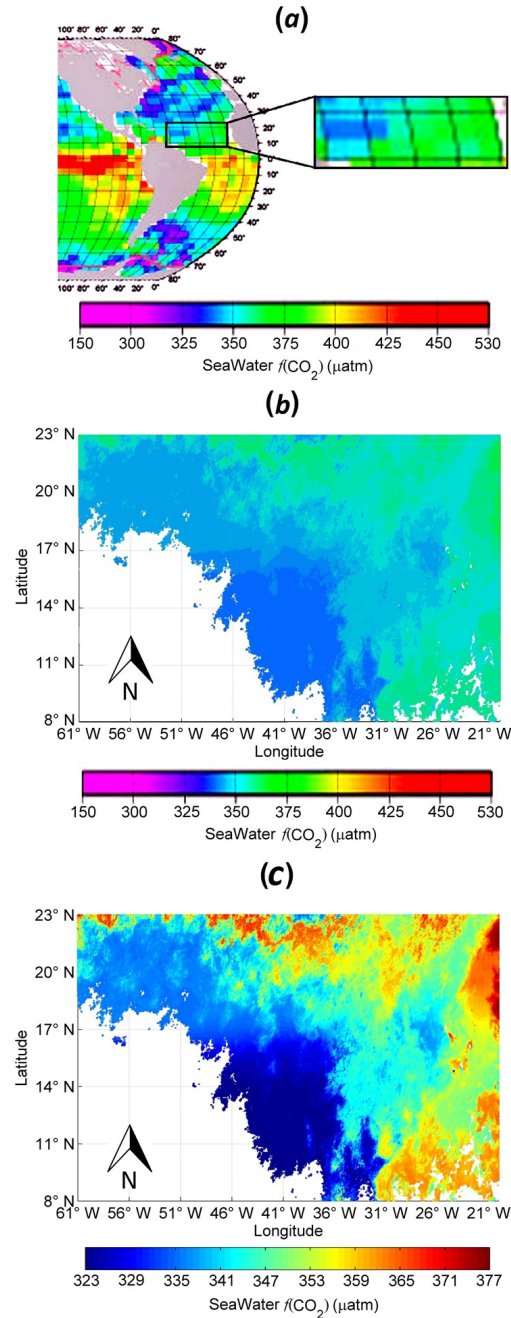


Figure 9: Distributions of surface seawater $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in March 2005: (a) Climatological map of Takahashi et al. (2014) ($4^\circ \times 5^\circ$ spatial resolution). (b) Map produced by the developed FNN, presented on the same $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ color scale as in (a) ($0.04^\circ \times 0.04^\circ$ spatial resolution). (c) The same map as in (b) with a color scale between minimum and maximum of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in this region.

Therefore, the fine resolution that offer remote sensing data, allows us to get a smoothness representation of detailed $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ concentrations, and signifi-

cantly improve our knowledge from the relatively rough climatological resolution (only $4^\circ \times 5^\circ$). The use of fine resolution ($0.04^\circ \times 0.04^\circ$) satellite products to determine $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ over large ocean areas, will undoubtedly improve the accuracy of the CO_2 air-sea fluxes estimates over the global ocean.

4 Conclusion

We have presented a methodological study that shows: 1) the feedforward neural network represents a good alternative for $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ interpolation, 2) the feedforward neural network provides better results than multiple linear regression, and 3) it becomes possible to estimate surface $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ exclusively from satellite products, with a fine resolution ($4 \text{ km} \times 4 \text{ km}$) over a large ocean area (from 8°N - 61°W to 23°N - 20°W) with an uncertainty of $\pm 8.7 \mu\text{atm}$ (which is in the order of a diurnal variation magnitude). We have investigated the parameters needed to estimate $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$, the results show that SST, SSS, and chl-*a* are sufficient as input of the model to provide a basin-wide maps of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ with a good accuracy.

This study further shows that the most crucial limiting factor for the accuracy of the interpolation is the high variability of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$. The second reason is the lack of data in some areas. Additional *in situ* observations are still needed in addition to satellite data to validate interpolation.

The comparison with the climatological $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map of Takahashi et al. (2014), shows that the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ map produced by the FNN provides new insights. In particular, the FNN method improves the accuracy of the $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ gradient, which provides a substantial benefits regarding to the CO_2 fluxes estimates.

Overall, this study is a first step toward, and opens the route to the quantification of $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ over the whole ocean based upon fine spatial and temporal resolution of satellite SST, SSS, and chl-*a* fields.

4.1 Acknowledgements

We greatly acknowledge Rawa Hassan EL Fallah and Elissar Gemayel for very helpful discussions and comments. This study has been performed as part of H. MOUSSA's Ph.D., which is funded by the MESRS (Ministère Algérien de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique).

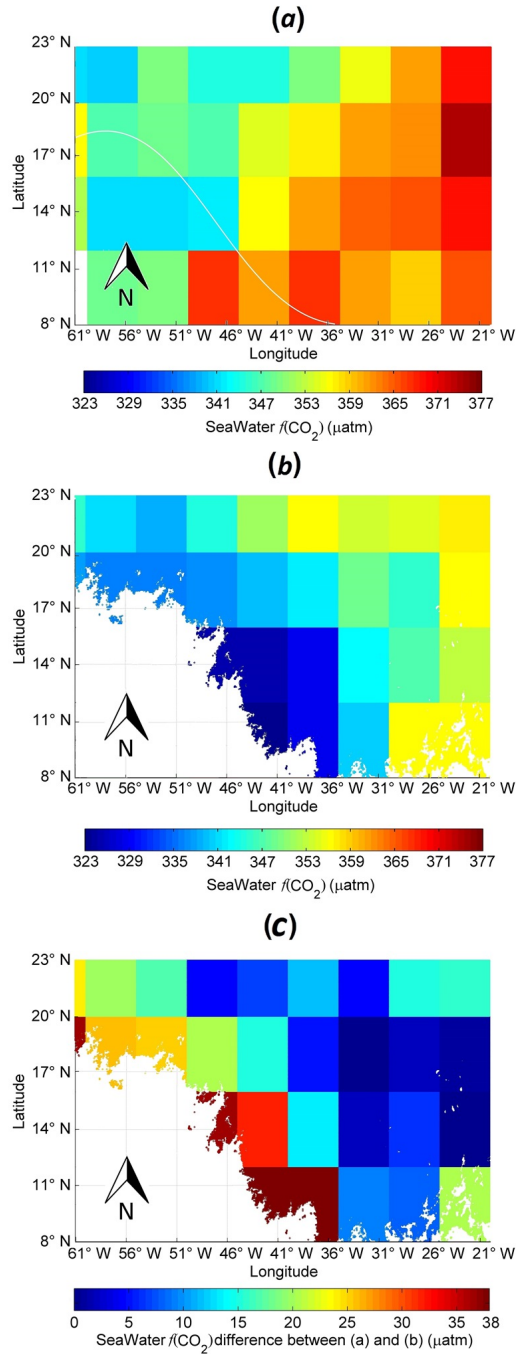


Figure 10: Distributions of surface seawater $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ in March 2005: (a) Climatological map of Takahashi et al. (2014) ($4^\circ \times 5^\circ$ spatial resolution), the white line represents the limit below which there are no data in (b) and (c). (b) Map produced by the developed FNN ($4^\circ \times 5^\circ$ spatial resolution). (c) The difference between $f(\text{CO}_2^{\text{sw}})$ maps in (a) and (b).

References

- Barreto, G. A. (2007). Time Series Prediction with the Self-Organizing Map: A Review. In Hammer, D. B. and Hitzler, D. P., editors, *Perspectives of Neural-Symbolic Integration*, volume 77, pages 135–158. SPRINGER BERLIN HEIDELBERG.
- Barreto, G. A. and Araújo, A. F. R. (2002). Non-linear Modeling of Dynamic Systems with the Self-Organizing Map. In Dorronsoro, J. R., editor, *Artificial Neural Networks — ICANN 2002*, volume 2415, pages 975–980. SPRINGER BERLIN HEIDELBERG.
- Benallal, M. A., Moussa, H., Touratier, F., Goyet, C., and Poisson, A. (2015). Ocean salinity from satellite-derived temperature in the Antarctic Ocean. *Antarctic Science*, FirstView:1–8.
- Bureau International Des Poids Et Mesures (1955). Dixième conférence générale des poids et mesures. Technical report, Bureau International Des Poids Et Mesures, Quai des Grands-Augustins, 55, Paris.
- Chen, C.-T. A. (1982). On the distribution of anthropogenic CO₂ in the Atlantic and Southern oceans. *DEEP-SEA RESEARCH PART I-OCEANOGRAPHIC RESEARCH PAPERS*, 29:563–580.
- Copin-Montegut, C. (1988). A new formula for the effect of temperature on the partial pressure of CO₂ in seawater. *MARINE CHEMISTRY*, 25:29–37.
- Copin-montegut, C. (1989). A new formula for the effect of temperature on the partial pressure of carbon dioxide in seawater, corrigendum. *MARINE CHEMISTRY*, 27:143–144.
- de Villiers, J. and Barnard, E. (1993). Backpropagation neural nets with one and two hidden layers. *IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS*, 4:136–141.
- Dlugokencky, E. and Tans, P. (2015). Trends in atmospheric carbon dioxide.
- Flexer, A. (2001). On the Use of Self-Organizing Maps for Clustering and Visualization. *INTELLIGENT DATA ANALYSIS*, 5:373–384.
- Friedrich, T. and Oeschler, A. (2009). Neural network-based estimates of North Atlantic surface pCO₂ from satellite data: A methodological study. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 114:C03020.
- Gordon, L. I. and Jones, L. B. (1973). The effect of temperature on carbon dioxide partial pressures in seawater. *MARINE CHEMISTRY*, 1:317–322.
- Goyet, C., Adams, R., and Eiseheid, G. (1998). Observations of the CO₂ system properties in the tropical Atlantic Ocean. *MARINE CHEMISTRY*, 60:49–61.
- Goyet, C., Millero, F. J., Poisson, A., and Shafer, D. K. (1993). Temperature dependence of CO₂ fugacity in seawater. *MARINE CHEMISTRY*, 44:205–219.
- Goyet, C. and Peltzer, E. T. (1994). Comparison of the August–September 1991 and 1979 surface partial pressure of CO₂ distribution in the Equatorial Pacific Ocean near 150°W. *MARINE CHEMISTRY*, 45:257–266.
- Goyet, C. and Peltzer, E. T. (1997). Variation of CO₂ partial pressure in surface seawater in the equatorial Pacific Ocean. *DEEP-SEA RESEARCH PART I-OCEANOGRAPHIC RESEARCH PAPERS*, 44:1611–1625.
- Goyet, C. and Poisson, A. (1989). New determination of carbonic acid dissociation constants in seawater as a function of temperature and salinity. *DEEP-SEA RESEARCH PART I-OCEANOGRAPHIC RESEARCH PAPERS*, 36:1635–1654.
- Inoue, H. Y., Ishii, M., Matsueda, H., Kawano, T., Murata, A., and Takasugi, Y. (2003). Distribution of the partial pressure of CO₂ in surface water ($p_{CO_2}^w$) between Japan and the Hawaiian Islands: $p_{CO_2}^w$ –SST relationship in the winter and summer. *TELLUS SERIES B-CHEMICAL AND PHYSICAL METEOROLOGY*, 55:456–465.
- Jamet, C., Moulin, C., and Lefèvre, N. (2007). Estimation of the oceanic pCO₂ in the North Atlantic from VOS lines in-situ measurements: parameters needed to generate seasonally mean maps. *ANNALES DE GEOPHYSIQUE*, 25:2247–2257.
- Lagerloef, G., Colomb, F. R., Le Vine, D., Wentz, F., Yueh, S., Ruf, C., Lilly, J., Gunn, J., Chao, Y., deCharon, A., Feldman, G., and Swift, C. (2008). The Aquarius/SAC-D Mission: Designed to Meet the Salinity Remote-Sensing Challenge. *OCEANOGRAPHY*, 21:68–81.
- Landschützer, P., Gruber, N., Bakker, D. C. E., Schuster, U., Nakaoka, S., Payne, M. R., Sasse, T. P., and Zeng, J. (2013). A neural network-based estimate of the seasonal to inter-annual variability of the Atlantic Ocean carbon sink. *BIOGEOSCIENCES*, 10:7793–7815.
- Le Quéré, C., Moriarty, R., Andrew, R. M., Peters, G. P., Ciais, P., Friedlingstein, P., Jones, S. D., Sitch, S., Tans, P., Arneeth, A., Boden, T. A., Bopp, L., Bozec, Y., Canadell, J. G., Chini, L. P., Chevallier, F., Cosca, C. E., Harris, I., Hoppema, M., Houghton, R. A., House, J. I., Jain, A. K., Johannessen, T., Kato, E., Keeling, R. F., Kitidis, V., Klein Goldewijk, K., Koven, C., Landa, C. S., Landschützer, P., Lenton, A., Lima, I. D., Marland, G., Mathis, J. T., Metzl, N., Nojiri, Y., Olsen, A., Ono, T., Peng, S., Peters, W., Pfeil, B., Poulter, B., Raupach, M. R., Regnier, P., Rödenbeck, C., Saito, S., Salisbury, J. E., Schuster, U., Schwinger, J., Sferian, R., Segsneider, J., Steinhoff, T., Stocker, B. D., Sutton, A. J., Takahashi, T., Tilbrook, B., van der

- Werf, G. R., Viovy, N., Wang, Y.-P., Wanninkhof, R., Wiltshire, A., and Zeng, N. (2015). Global carbon budget 2014. *EARTH SYSTEM SCIENCE DATA*, 7:47–85.
- Lefèvre, N., J. Watson, A. J., and R. Watson, A. R. (2005). A comparison of multiple regression and neural network techniques for mapping in situ pCO₂ data. *TELLUS SERIES B-CHEMICAL AND PHYSICAL METEOROLOGY*, 57:375–384.
- Lefèvre, N., Moore, G., Aiken, J., Watson, A., Cooper, D., and Ling, R. (1998). Variability of pCO₂ in the tropical Atlantic in 1995. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 103:5623–5634.
- Lefèvre, N. and Taylor, A. (2002). Estimating pCO₂ from sea surface temperatures in the Atlantic gyres. *DEEP-SEA RESEARCH PART I-OCEANOGRAPHIC RESEARCH PAPERS*, 49:539–554.
- Lefèvre, N., Urbano, D. F., Gallois, F., and Diverrès, D. (2014). Impact of physical processes on the seasonal distribution of the fugacity of CO₂ in the western tropical Atlantic. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 119:646–663.
- Levenberg, K. (1944). A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *QUARTERLY JOURNAL OF APPLIED MATHEMATICS*, 2:164–168.
- Marquardt, D. (1963). An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *JOURNAL OF THE SOCIETY FOR INDUSTRIAL AND APPLIED MATHEMATICS*, 11:431–441.
- McCulloch, W. S. and Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *BULLETIN OF MATHEMATICAL BIOLOGY*, 5:115–133.
- Mittelstaedt, E. (1983). The upwelling area off Northwest Africa—A description of phenomena related to coastal upwelling. *PROGRESS IN OCEANOGRAPHY*, 12:307–331.
- Moussa, H., Benallal, M. A., Goyet, C., Lefèvre, N., EL Jai, M. C., Guglielmi, V., and Touratier, F. (2015). A comparison of Multiple Non-linear regression and neural network techniques for sea surface salinity estimation in the tropical Atlantic ocean based on satellite data. In El Yacoubi, S., Affi, L., Zerrik, E. H., and Tridane, A., editors, *CMACS 2014 - Colloque de Modélisation, Analyse et Contrôle des Systèmes*, volume 49, pages 65–78, Al-Akhawayn University, Morocco. ESAIM: PROCEEDINGS AND SURVEYS.
- Nakaoka, S., Telszewski, M., Nojiri, Y., Yasunaka, S., Miyazaki, C., Mukai, H., and Usui, N. (2013). Estimating temporal and spatial variation of ocean surface pCO₂ in the North Pacific using a self-organizing map neural network technique. *BIOGEOSCIENCES*, 10:6093–6106.
- Olsen, A., Bellerby, R. G. J., Johannessen, T., Omar, A. M., and Skjelvan, I. (2003). Interannual variability in the wintertime air–sea flux of carbon dioxide in the northern North Atlantic, 1981–2001. *DEEP-SEA RESEARCH PART I-OCEANOGRAPHIC RESEARCH PAPERS*, 50:1323–1338.
- Panchal, G., Ganatra, A., Shah, P., and Panchal, D. (2011). Determination of over-learning and over-fitting problem in back propagation neural network. *INTERNATIONAL JOURNAL ON SOFT COMPUTING*, 2:40–51.
- Park, G.-H. and Wanninkhof, R. (2012). A large increase of the CO₂ sink in the western tropical North Atlantic from 2002 to 2009. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 117:C08029.
- Pfeil, B., Olsen, A., Bakker, D. C. E., Hankin, S., Koyuk, H., Kozyr, A., Malczyk, J., Manke, A., Metzl, N., Sabine, C. L., Akl, J., Alin, S. R., Bates, N., Bellerby, R. G. J., Borges, A., Boutin, J., Brown, P. J., Cai, W.-J., Chavez, F. P., Chen, A., Cosca, C., Fassbender, A. J., Feely, R. A., González-Dávila, M., Goyet, C., Hales, B., Hardman-Mountford, N., Heinze, C., Hood, M., Hoppema, M., Hunt, C. W., Hydes, D., Ishii, M., Johannessen, T., Jones, S. D., Key, R. M., Körtzinger, A., Landschützer, P., Lauvset, S. K., Lefèvre, N., Lenton, A., Lourantou, A., Merlivat, L., Midorikawa, T., Mintrop, L., Miyazaki, C., Murata, A., Nakadate, A., Nakano, Y., Nakaoka, S., Nojiri, Y., Omar, A. M., Padin, X. A., Park, G.-H., Paterson, K., Perez, F. F., Pierrot, D., Poisson, A., Ríos, A. F., Santana-Casiano, J. M., Salisbury, J., Sarma, V. V. S. S., Schlitzer, R., Schneider, B., Schuster, U., Sieger, R., Skjelvan, I., Steinhoff, T., Suzuki, T., Takahashi, T., Tedesco, K., Telszewski, M., Thomas, H., Tilbrook, B., Tjiputra, J., Vandemark, D., Veness, T., Wanninkhof, R., Watson, A. J., Weiss, R., Wong, C. S., and Yoshikawa-Inoue, H. (2013). A uniform, quality controlled Surface Ocean CO₂ Atlas (SOCAT). *EARTH SYSTEM SCIENCE DATA*, 5:125–143.
- Reul, N., Tenerelli, J., Boutin, J., Chapron, B., Paul, F., Brion, E., Gaillard, F., and Archer, O. (2012). Overview of the First SMOS Sea Surface Salinity Products. Part I: Quality Assessment for the Second Half of 2010. *IEEE TRANSACTIONS ON GEOSCIENCE AND REMOTE SENSING*, 50:1636–1647.
- Rosenblatt, F. (1958). The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *PSYCHOLOGICAL REVIEW*, 65:386–408.
- Rumelhart, D. E. and McClelland, J. L., editors (1986). *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition, Vol. 1: Foundations*. MIT PRESS, Cambridge, MA, USA.
- Sabine, C., Ducklow, H., and Hood, M. (2010). International Carbon Coordination: Roger Revelle’s Legacy

- in the Intergovernmental Oceanographic Commission. *OCEANOGRAPHY*, 23(3):48–61.
- Schuster, U., McKinley, G. A., Bates, N., Chevallier, F., Doney, S. C., Fay, A. R., González-Dávila, M., Gruber, N., Jones, S., Krijnen, J., Landschützer, P., Lefèvre, N., Manizza, M., Mathis, J., Metzl, N., Olsen, A., Rios, A. F., Rödenbeck, C., Santana-Casiano, J. M., Takahashi, T., Wanninkhof, R., and Watson, A. J. (2013). An assessment of the Atlantic and Arctic sea—air CO₂ fluxes, 1990–2009. *BIOGEOSCIENCES*, 10:607–627.
- Stephens, M. P., Samuels, G., Olson, D. B., Fine, R. A., and Takahashi, T. (1995). Sea-air flux of CO₂ in the North Pacific using shipboard and satellite data. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 100:13571–13583.
- Stramma, L. and Schott, F. (1999). The mean flow field of the tropical Atlantic Ocean. *DEEP-SEA RESEARCH PART II-TOPICAL STUDIES IN OCEANOGRAPHY*, 46:279–303.
- Takahashi, T. (1961). Carbon dioxide in the atmosphere and in Atlantic Ocean water. *JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH-OCEANS*, 66:477–494.
- Takahashi, T., Feely, R. A., Weiss, R. F., Wanninkhof, R. H., Chipman, D. W., Sutherland, S. C., and Takahashi, T. T. (1997). Global air-sea flux of CO₂: An estimate based on measurements of sea—air pCO₂ difference. *PROCEEDING OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCE OF THE UNITED STATES OF AMERICA*, 94:8292–8299.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Chipman, D. W., Goddard, J. G., Ho, C., Newberger, T., Sweeney, C., and Munro, D. R. (2014). Climatological distributions of pH, pCO₂, total CO₂, alkalinity, and CaCO₃ saturation in the global surface ocean, and temporal changes at selected locations. *MARINE CHEMISTRY*, 164:95–125.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Sweeney, C., Poisson, A., Metzl, N., Tilbrook, B., Bates, N., Wanninkhof, R., Feely, R. A., Sabine, C., Olafsson, J., and Nojiri, Y. (2002). Global sea—air CO₂ flux based on climatological surface ocean pCO₂, and seasonal biological and temperature effects. *DEEP-SEA RESEARCH PART II-TOPICAL STUDIES IN OCEANOGRAPHY*, 49:1601–1622.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Wanninkhof, R., Sweeney, C., Feely, R. A., Chipman, D. W., Hales, B., Friederich, G., Chavez, F., Sabine, C., Watson, A., Bakker, D. C. E., Schuster, U., Metzl, N., Yoshikawa-Inoue, H., Ishii, M., Midorikawa, T., Nojiri, Y., Körtzinger, A., Steinhoff, T., Hoppema, M., Olafsson, J., Arnarson, T. S., Tilbrook, B., Johannessen, T., Olsen, A., Bellerby, R., Wong, C. S., Delille, B., Bates, N. R., and de Baar, H. J. W. (2009). Climatological mean and decadal change in surface ocean pCO₂, and net sea—air CO₂ flux over the global oceans. *DEEP-SEA RESEARCH PART II-TOPICAL STUDIES IN OCEANOGRAPHY*, 56:554–577.
- Tamura, S. and Tateishi, M. (1997). Capabilities of a four-layered feedforward neural network: four layers versus three. *IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS*, 8:251–255.
- Tans, P. and Keeling, R. (2015). Trends in Atmospheric Carbon Dioxide.
- Telszewski, M., Chazottes, A., Schuster, U., Watson, A. J., Moulin, C., Bakker, D. C. E., González-Dávila, M., Johannessen, T., Körtzinger, A., Lüger, H., Olsen, A., Omar, A., Padin, X. A., Ríos, A. F., Steinhoff, T., Santana-Casiano, M., Wallace, D. W. R., and Wanninkhof, R. (2009). Estimating the monthly pCO₂ distribution in the North Atlantic using a self-organizing neural network. *BIOGEOSCIENCES*, 6:1405–1421.
- Xu, R. and Wunsch, D. (2005). Survey of clustering algorithms. *IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS*, 16:645–678.
- Zeng, J., Nojiri, Y., Landschützer, P., Telszewski, M., and Nakaoka, S. (2014). A Global Surface Ocean fCO₂ Climatology Based on a Feed-Forward Neural Network. *JOURNAL OF ATMOSPHERIC AND OCEANIC TECHNOLOGY*, 31:1838–1849.

A.2.3 Climatological variations of total alkalinity and total inorganic carbon in the Mediterranean Sea surface waters

- **Journal** : Earth System Dynamic.
- **Date de publication** : 24 Aout 2015.
- **DOI** : 10.5194/esdd-6-1499-2015.
- **Résumé** : Une compilation de plusieurs données de croisières 1998-2013 a été utilisée pour l'estimation de l'alcalinité totale (A_T) et le carbone inorganique total (C_T) à partir des mesures de salinité et de température dans les eaux de surface de la mer Méditerranée. Les équations optimales ont été choisies sur la base des résultats de la validation croisée en 10-fois et a révélé que des polynômes du deuxième et troisième ordre pour ajuster les données A_T et C_T respectivement. L'estimation de l' A_T de surface montrent une amélioration de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) de $\pm 10,6 \mu\text{molkg}^{-1}$. En outre, nous présentons le premier paramétrage annuelle de C_T moyen pour les eaux de surface de la mer Méditerranée avec un RMSE de $\pm 14,3 \mu\text{molkg}^{-1}$. En excluant les mers de l'Adriatique et la mer Égée (marginales), ces équations peuvent être utilisées pour estimer l' A_T et la C_T dans le cas de l'absence de mesures *in situ*. Les sept ans en moyenne (2005-2012) cartographiées en utilisant les climatologies du World Ocean Atlas 2013 a montré que dans les eaux de surface l' A_T et le C_T ont des tendances similaires avec une augmentation graduelle vers l'Est. La variabilité de la surface est influencée par l'afflux des eaux froides de l'Atlantique par le détroit de Gibraltar et par le gradient oligotrophe et thermohaline qui caractérisent la mer Méditerranée. La saisonnalité été-hiver a également été cartographiée et a montré des motifs différents pour l' A_T et le C_T . Pendant l'hiver, les concentrations d' A_T et de C_T étaient plus élevées dans l'ouest que dans le bassin oriental, principalement en raison de la plongée de la couche de mélange et la remontée des eaux denses. Le contraire a été observé en été où le bassin oriental a été marqué par la hausse des concentrations de l' A_T et le C_T par rapport à l'hiver. La forte évaporation qui a lieu dans cette saison avec l'ultra-oligotrophie du bassin oriental détermine l'augmentation de deux concentrations de l' A_T et du C_T .
- **Citation** : Gemayel, E., Hassoun, A. E. R., Benallal, M. A., Goyet, C., Rivaro, P., Abboud-Abi Saab, M., Ziveri, P. (2015). Climatological variations of total alkalinity and total dissolved inorganic carbon in the Mediterranean Sea surface waters. Earth System Dynamics, 6(2), 789–800. doi:10.5194/esd-6-789-2015.

Earth Syst. Dynam., 6, 789–800, 2015
www.earth-syst-dynam.net/6/789/2015/
doi:10.5194/esd-6-789-2015
© Author(s) 2015. CC Attribution 3.0 License.



Earth System
Dynamics



Climatological variations of total alkalinity and total dissolved inorganic carbon in the Mediterranean Sea surface waters

E. Gemayel^{1,2,3}, A. E. R. Hassoun³, M. A. Benallal^{1,2}, C. Goyet^{1,2}, P. Rivaro⁴, M. Abboud-Abi Saab³,
E. Krasakopoulou⁵, F. Touratier^{1,2}, and P. Ziveri^{6,7}

¹Université de Perpignan Via Domitia, IMAGES_ESPACE-DEV, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan
CEDEX 9, France

²ESPACE-DEV, UG UA UR UM IRD, Maison de la télédétection, 500 rue Jean-François Breton, 34093
Montpellier CEDEX 5, France

³National Council for Scientific Research, National Center for Marine Sciences, P.O. Box
534, Batroun, Lebanon

⁴University of Genoa, Department of Chemistry and Industrial Chemistry, via Dodecaneso 31,
16146 Genoa, Italy

⁵University of the Aegean, Department of Marine Sciences, University Hill, Mytilene 81100, Greece

⁶Institute of Environmental Science and Technology (ICTA) and Department of Biology (BAVE), Universitat
Autònoma de Barcelona ICTA-ICP, Edifici Z, Carrer de les columnes s/n, 08193 Bellaterra, Barcelona, Spain

⁷Catalan Institution for Research and Advanced Studies (ICREA), 08010 Barcelona, Spain

Correspondence to: E. Gemayel (elissargemayel@hotmail.com)

Received: 28 June 2015 – Published in Earth Syst. Dynam. Discuss.: 24 August 2015

Revised: 16 November 2015 – Accepted: 1 December 2015 – Published: 15 December 2015

Abstract. A compilation of data from several cruises between 1998 and 2013 was used to derive polynomial fits that estimate total alkalinity (A_T) and total dissolved inorganic carbon (C_T) from measurements of salinity and temperature in the Mediterranean Sea surface waters. The optimal equations were chosen based on the 10-fold cross-validation results and revealed that second- and third-order polynomials fit the A_T and C_T data respectively. The A_T surface fit yielded a root mean square error (RMSE) of $\pm 10.6 \mu\text{mol kg}^{-1}$, and salinity and temperature contribute to 96% of the variability. Furthermore, we present the first annual mean C_T parameterization for the Mediterranean Sea surface waters with a RMSE of $\pm 14.3 \mu\text{mol kg}^{-1}$. Excluding the marginal seas of the Adriatic and the Aegean, these equations can be used to estimate A_T and C_T in case of the lack of measurements. The identified empirical equations were applied on the 0.25° climatologies of temperature and salinity, available from the World Ocean Atlas 2013. The 7-year averages (2005–2012) showed that A_T and C_T have similar patterns with an increasing eastward gradient. The variability is influenced by the inflow of cold Atlantic waters through the Strait of Gibraltar and by the oligotrophic and thermohaline gradient that characterize the Mediterranean Sea. The summer–winter seasonality was also mapped and showed different patterns for A_T and C_T . During the winter, the A_T and C_T concentrations were higher in the western than in the eastern basin. The opposite was observed in the summer where the eastern basin was marked by higher A_T and C_T concentrations than in winter. The strong evaporation that takes place in this season along with the ultra-oligotrophy of the eastern basin determines the increase of both A_T and C_T concentrations.

1 Introduction

The role of the ocean in mitigating climate change is well known, as it absorbs about 2 Pg C yr^{-1} of anthropogenic CO_2 (Wanninkhof et al., 2013). Worldwide measurements of surface seawater CO_2 properties are being conducted as they are important for advancing our understanding of the carbon cycle and the underlying processes controlling it. For instance, the buffer capacity of the CO_2 system varies with temperature, the distribution of total inorganic carbon, and total alkalinity (Omta et al., 2011).

Our understanding of the open-ocean CO_2 dynamics has drastically improved over the years (Rödenbeck et al., 2013; Sabine et al., 2004; Takahashi et al., 2009; Watson and Orr, 2003). However, our understanding of marginal seas such as the Mediterranean remains poor due to the limited measurements combined with the enhanced complexity of the land–ocean interactions. In the Mediterranean Sea, available measurements of the carbonate system are still scarce and only available in specific regions such as the Alboran Sea (Copin-Montégut, 1993), the Gibraltar Strait (Santana-Casiano et al., 2002), the DYFAMED (Dynamics of Atmospheric Fluxes in the Mediterranean Sea) time series in the Ligurian Sea (Bégovic and Copin-Montégut, 2002; Copin-Montégut and Bégovic, 2002; Touratier and Goyet, 2009), and the Otranto Strait (Krasakopoulou et al., 2011). Large geographical distribution of CO_2 data are often confined to cruises with a short sampling period (Álvarez et al., 2014; Goyet et al., 2015; Rivaro et al., 2010; Schneider et al., 2007; Touratier et al., 2012). Numerical models have provided some insights into the carbon dynamics in the Mediterranean Sea (Cosarini et al., 2015; D’Ortenzio et al., 2008; Louanchi et al., 2009), but it remains important to constrain the system from in situ measurements to validate their output.

The scarcity of the CO_2 system measurements in the Mediterranean Sea make it difficult to constrain the CO_2 uptake in this landlocked area and also limits our understanding of the magnitude and mechanisms driving the natural variability on the ocean carbon system (Touratier and Goyet, 2009). Empirical modelling has been successfully used to study the marine carbon biogeochemical processes such as the estimation of biologically produced O_2 in the mixed layer (Keeling et al., 1993), estimation of global inventories of anthropogenic CO_2 (Sabine et al., 2004), and estimation of the CaCO_3 cycle (Koeve et al., 2014). Empirical algorithms were also used to relate limited A_T and C_T measurements to more widely available physical parameters such as salinity and temperature (Bakker et al., 1999; Ishii et al., 2004; Lee et al., 2006). The A_T and C_T fields can then be used to calculate $p\text{CO}_2$ fields and thus predict the CO_2 flux across the air–sea interface (McNeil et al., 2007).

Previous empirical approaches to constrain A_T in the Mediterranean Sea have only covered selected cruises (Schneider et al., 2007; Touratier and Goyet, 2009) or local areas such as the DYFAMED time-series station or the Strait

of Gibraltar (Copin-Montégut, 1993; Santana-Casiano et al., 2002). As for C_T , empirical models have only been applied to data below the mixed layer depth (MLD) following the equation of Goyet and Davis (1997) at the DYFAMED time-series station (Touratier and Goyet, 2009) or using the composite data set from Meteor 51/2 and DYFAMED (Touratier and Goyet, 2011). Lovato and Vichi (2015) also proposed an optimal multiple linear model for C_T using the Meteor 84/3 full water column data. To the best of our knowledge the reconstruction of C_T in surface waters has not been yet performed in the Mediterranean Sea. This is probably due to the lack of measurements available for previous studies to capture the more complex interplay of biological, physical and solubility processes that drive C_T variability in the surface waters.

In this study we have compiled CO_2 system measurements from 14 cruises between 1995 and 2013, which allowed us to constrain an improved and new empirical algorithm for A_T and C_T in the Mediterranean Sea surface waters. We also evaluated the spatial and seasonal variability of the carbon system in the Mediterranean Sea surface waters by mapping the 2005–2012 annual and seasonal averages of surface A_T and C_T using the 0.25° climatologies of salinity and temperature from the WOA13.

2 Methods

2.1 Surface A_T and C_T data in the Mediterranean Sea

Between 1998 and 2013, there were multiple research cruises sampling the seawater properties throughout the Mediterranean Sea. This includes parameters of the carbonate system, more specifically A_T , pH, and C_T and physico-chemical properties of in situ salinity and temperature. In this study we have compiled surface water samples between 0 and 10 m depth, totaling 490 and 400 measurements for A_T and C_T respectively (Table 1).

2.2 Polynomial model for fitting A_T and C_T data

Two polynomial equations for fitting A_T or C_T from salinity (S) alone or combined with sea surface temperature (T) in the surface waters (0–10 m) of the Mediterranean Sea were chosen from the results of the 10-fold cross-validation method (Breiman, 1996; Stone, 1974). This type of analysis was previously performed by Lee et al. (2006) for general relationships of A_T with salinity and temperature. This model validation technique is performed by randomly portioning the data set into 10 equal subsamples. One subsample is used as the validation data and the nine remaining subsamples are used as training data. The cross-validation process is then repeated 10 times, with each of the 10 subsamples used exactly once as the validation data. In this manner, all observations are used both for training and validation, and each observation is used for validation only once. The best fit is chosen by computing the residuals from each regression model and

Table 1. List of available carbonate system datasets for the Mediterranean Sea.

Data set	Period	Area	Carbonate system parameters	Data points	Reference
Prosope	Sep–Oct 1999	Mediterranean Sea	A_T and pH	20	Bégovic and Copin (2013)
Meteor 51/2	Oct–Nov 2001	Eastern Mediterranean	A_T and C_T	16	Schneider and Roether (2007)
Meteor 84/3	Apr 2004	Southern Mediterranean	A_T , C_T and pH	16	Tanhua et al. (2012)
Carbogib 2-6	2005–2006	Gibraltar Strait	A_T and pH	28	Huertas (2007a, b, c, d, e)
Gift 1–3	2005–2006	Gibraltar Strait	A_T and pH	12	Huertas (2007f, g, h)
Transmed	Jun 2007	Eastern Mediterranean	A_T and pH	20	Rivaro et al. (2010)
Sesame IT-4	Mar–Apr 2008	Northern Mediterranean	A_T and C_T	16	SeaDataNet
Boum	Jun–Jul 2008	Mediterranean Sea	A_T and C_T	75	Touratier et al. (2012)
Pacific-Celebes	2007–2009	Mediterranean Sea	A_T and C_T	22	Hydes et al. (2012)
Moose-GE	May 2010	Ligurian Sea	A_T and C_T	44	SeaDataNet
Hesperides	May 2013	Gibraltar Strait	A_T	10	Perez et al. (2013)
MedSea	May 2013	Southern Mediterranean	A_T and C_T	59	Goyet et al. (2015)
DYFAMED time series	1998–2013	Ligurian Sea	A_T and C_T	152	Oceanological Observatory of Villefranche-sur-Mer

computing independently the performance of the selected optimal polynomial on the remaining subsets.

The analysis was applied for polynomials of order 1–3, and the optimal equation was chosen based on the lowest root mean square error (RMSE) and the highest coefficient of determination (r^2). High-order polynomials (4 and above) were discarded because they can be oscillatory between the data points, leading to a poorer fit to the data.

The data set consists of 490 and 400 data points for A_T and C_T respectively (Table 1). To ensure the same spatial and temporal coverage of the polynomial fits, the same training data set was retained for both A_T and C_T . This was performed by selecting stations where both parameters were simultaneously measured, yielding 360 data points (Fig. 1). To validate the general use of the proposed parameterizations we tested the algorithms with measurements which are not included in the fits (validation data set). For A_T , the validation data set consists of 130 data points which are formed from the testing subset of the 10th fold (40 data points) and from cruises where A_T was measured without accompanying C_T (90 data points). For C_T , the validation data set is the same as the testing subset of the 10th fold (40 data points).

2.3 Climatological and seasonal mapping of A_T and C_T

The climatological and seasonal averages of salinity (Zweng et al., 2013) and temperature (Locarnini et al., 2013) in $0.25 \times 0.25^\circ$ grid cells were downloaded from the WOA13. The 7-year averages (2005–2012) and the summer–winter seasonality of A_T and C_T fields were mapped at 5 m depth by applying the respective derived algorithms in their appropriate ranges of S and T . The summer seasonality is defined as the average of the months of July, August, and September. The winter seasonality is defined as the average of the months of January, February, and March.

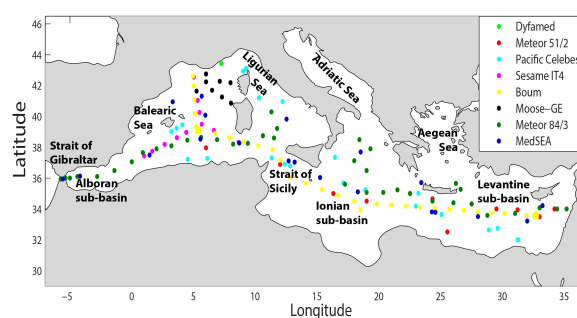


Figure 1. Spatial distribution of data points used to initiate the fits of A_T and C_T .

3 Results and discussion

3.1 Fitting A_T in the Mediterranean Sea surface waters

In the surface ocean the A_T variability is controlled by freshwater addition or the effect of evaporation, and salinity contributes to more than 80% of the A_T variability (Millero et al., 1998). In the Mediterranean Sea, several studies have shown that the relationship between A_T and S is linear (Copin-Montégut, 1993; Copin-Montégut and Bégovic, 2002; Hassoun et al., 2015b; Jiang et al., 2014; Rivaro et al., 2010; Schneider et al., 2007). In other studies, the sea surface temperature (T) has been included as an additional proxy for changes in surface water A_T related to convective mixing (Lee et al., 2006; Touratier and Goyet, 2011).

The results of the 10-fold cross-validation analysis revealed that the optimal model for A_T is a second-order polynomial in which A_T is fitted to both S and T (Eq. 1).

$$A_T = 2558.4 + 49.83(S - 38.2) - 3.89(T - 18) - 3.12(S - 38.2)^2 - 1.06(T - 18)^2. \quad (1)$$

valid for $T > 13^\circ\text{C}$ and $36.30 < S < 39.65$; $n = 375$; $r^2 = 0.96$; and $\text{RMSE} = 10.6 \mu\text{mol kg}^{-1}$,

A linear relationship between A_T and S yields a higher RMSE ($14.5 \mu\text{mol kg}^{-1}$) and a lower r^2 (0.91) than Eq. (1). In a semi-enclosed basin such as the Mediterranean Sea, the insulation and high evaporation as well as the input of rivers and little precipitation leads to a negative freshwater balance (Rohling et al., 2009). The resulting anti-estuarine thermohaline circulation could explain the contribution of temperature to the A_T variability (Touratier and Goyet, 2011).

The residuals of the training data set used to generate the second-order polynomial fit for A_T are presented in Fig. 2a. Most of the A_T residuals (340 out of 375) were within a range of $\pm 15 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ). However, 35 residuals were high up to $\pm 30 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ). Applying the A_T algorithm to the testing data set (Fig. 2b) yields a mean residual of $0.91 \pm 10.30 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ), and only six data points have residuals higher than $\pm 15 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ). Furthermore, to make sure that the A_T algorithm does not overfit the data, we tested the difference in means between the RMSE and residuals between the training set compared to the testing set. The results show that for both the RMSE and mean residual, we cannot reject the null hypothesis (that assumes equal means) between the training and validation data sets (Table 2).

The comparison of the RMSE reported by other studies with that of Eq. (1) does not indicate if the parameterization developed here has advanced or not on previous attempts in the Mediterranean Sea. In that order, we independently applied each of the previous equations on the same training data set used to develop Eq. (1) and then computed the RMSE and r^2 for every one (Table 3). The results show that Eq. (1) has a lower RMSE and a higher r^2 than all of the parameterizations presented in Table 3. For instance, the general relationship of Lee et al. (2006) applied to the data set of this study yields an RMSE as high as $\pm 40.50 \mu\text{mol kg}^{-1}$. The RMSE of other studies developed strictly in the Mediterranean Sea varied from ± 13.81 to $\pm 26.11 \mu\text{mol kg}^{-1}$ using the equations of Touratier and Goyet (2011) and Schneider et al. (2007) respectively.

By applying directly the previous parameterizations to our training data set, the calculated RMSEs are significantly higher than the ones reported in their respective studies. For instance the reported RMSE in Lee et al. (2006) for subtropical oceanic regions is $\pm 8 \mu\text{mol kg}^{-1}$ and that of Schneider et al. (2007) for the Meteor 51/2 cruise is $\pm 4.2 \mu\text{mol kg}^{-1}$. This shows that previous models were constrained by their spatial coverage, time span, and used data sets. In fact the previous equations were calculated in local areas such as the

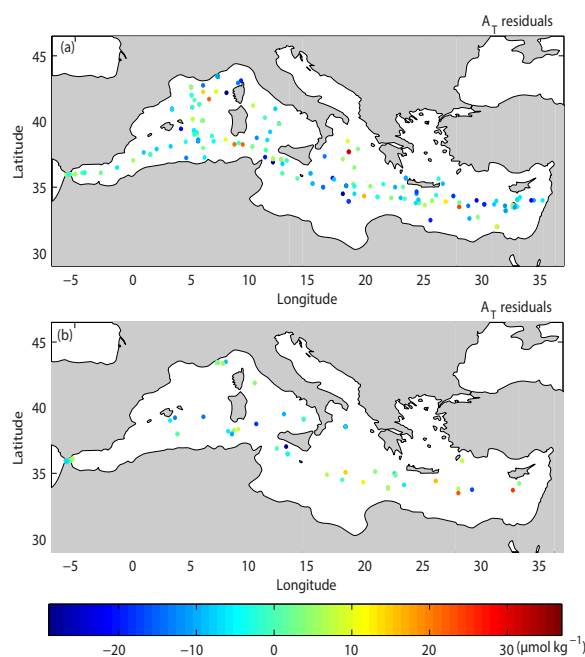


Figure 2. Map of the residuals of the A_T algorithm (Eq. 1) applied to the (a) training and (b) testing data sets.

Alboran Sea (Copin-Montégut, 1993), the Strait of Gibraltar (Santana-Casiano et al., 2002), and the DYFAMED Site (Copin-Montégut and Bégovic, 2002; Touratier and Goyet, 2009). On a large scale, equations were applied using limited data sets such as the Meteor 51/2 cruise in October–November 2001 (Schneider et al., 2007), the Transmed cruise in May–June 2007 (Rivaro et al., 2010), and the Meteor 51/2 and DYFAMED time-series stations (Touratier and Goyet, 2011).

The proposed algorithm including surface data from multiple cruises, and on a large time span, presents a more representative relationship to estimate A_T from S and T than the previously presented equations (Table 3). In Eq. (1), T and S contribute to 96% of the A_T variability and the RMSE of $\pm 10.6 \mu\text{mol kg}^{-1}$ presents a significant improvement of the spatial and temporal estimations of A_T in the Mediterranean Sea surface waters (mean difference t test, $H = 1$; $p = 0.04$).

3.2 Fitting C_T in the Mediterranean Sea surface waters

The surface C_T concentrations are influenced by lateral and vertical mixing, photosynthesis, oxidation of organic matter and changes in temperature and salinity (Poisson et al., 1993; Takahashi et al., 1993). All these processes are directly or indirectly correlated with sea surface temperature (Lee et al., 2000). Hence, the parameterization of C_T includes both physical (S and T) and/or biological parameters (Bakker et

Table 2. Mean difference t test for the A_T algorithm between the training and validation data sets

	Training data set	Validation data set	
RMSE ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	10.60	10.34	Mean difference t test: $H = 0$; $p = 0.83$
Mean residual ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	$2.64 \times 10^{-13} \pm 10.57$	0.91 ± 10.30	Mean difference t test: $H = 0$; $p = 0.42$

Table 3. Performance of the different parameterizations for the estimation of A_T applied independently to the training data set of this study.

Region	Parameterization	RMSE ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	r^2	Reference
Alboran Sea	$A_T = 94.85(S) - 1072.6$	± 16.61	0.92	Copin-Montégut (1993)
DYFAMED site	$A_T = 93.99(S) - 1038.1$	± 16.31	0.92	Copin-Montégut and Bégovic (2002)
Strait of Gibraltar	$A_T = 92.28(S) - 968.7$	± 16.48	0.92	Santana-Casiano et al. (2002)
Mediterranean Sea	$A_T = 73.7(S) - 285.7$	± 26.11	0.68	Schneider et al. (2007)
DYFAMED site	$A_T = 99.26(S) - 1238.4$	± 18.53	0.91	Touratier and Goyet (2009)
Western Mediterranean	$A_T = 95.25(S) - 1089.3$	± 16.97	0.92	Rivaro et al. (2010)
Eastern Mediterranean	$A_T = 80.04(S) - 499.8$	± 14.58	0.91	
Mediterranean Sea	$A_T = 1/(6.57 \times 10^{-5} + 1.77 - 10^{-2}) /$ $S - (5.93 - 10^{-4}(\ln(\theta)) / \theta^2)$	± 13.81	0.92	Touratier and Goyet (2011)
Global relationship (subtropics)	$A_T = 2305 + 58.66(S - 35) + 2.32(S - 35)^2$ $+ 1.41(T - 20) + 0.04(T - 20)^2$	± 40.50	0.26	Lee et al. (2006)

al., 1999; Bates et al., 2006; Koffi et al., 2010; Lee et al., 2000; Sasse et al., 2013).

The results of the 10-fold cross-validation analysis showed that a first-order polynome fits C_T to S and T with an RMSE of $16.25 \mu\text{mol kg}^{-1}$ and $r^2 = 0.87$. These values are comparable to the RMSE and r^2 found by previous empirical approaches applied in the eastern Atlantic (Bakker et al., 1999; Koffi et al., 2010). However, we found that a third-order polynome improved the RMSE and r^2 of the equation compared to the first-order fit (Eq. 2). Hence we will retain the large data set used to develop Eq. (2), where temperature and salinity explain 90 % of the C_T variability encountered in the Mediterranean Sea surface waters. The remaining 10 % could be attributed to the biological and air–sea exchange contributions to the C_T variability.

$$C_T = 2234 + 38.15(S - 38.2) - 14.38(T - 17.7) - 4.48(S - 38.2)^2 - 1.43(S - 38.2)(T - 17.7) + 9.62(T - 17.7)^2 - 1.10(S - 38.2)^3 + 3.53(T - 17.7)(S - 38.2)^2 + 1.47(S - 38.2)(T - 17.7)^2 - 4.61(T - 17.7)^3, \quad (2)$$

valid for $T > 13^\circ\text{C}$ and $36.30 < S < 39.65$; $n = 375$, $r^2 = 0.90$; and RMSE = $14.3 \mu\text{mol kg}^{-1}$.

The C_T parameterization developed in this study (Eq. 2) showed a higher uncertainty than that of A_T regarding both RMSE and r^2 . The estimation of C_T in the mixed layer adds a high uncertainty due to the seasonal variability (Sabine et al., 2004). Also in surface waters, the C_T are directly affected by air–sea exchange, and their concentrations will increase in response to the oceanic uptake of anthropogenic CO_2 .

Previous models accounted for the anthropogenic biases in the C_T measurements by calculating the C_T rate of increase (Bates, 2007; Lee et al., 2000; Sasse et al., 2013; Takahashi et al., 2014). However, in a study, Lee et al. (2000) also did not correct the C_T concentrations for regions above 30° latitude such as the Mediterranean Sea. In the following we will assess the importance of accounting or not for anthropogenic biases in the C_T measurements. In that order we downloaded the monthly atmospheric pCO_2 concentrations measured from 1999 to 2013 at the Lampedusa Island station (Italy) from the World Data Centre for Greenhouse Gases (<http://ds.data.jma.go.jp/gmd/wdcdgg/>). Following the method described by Sasse et al. (2013), we corrected the C_T measurements to the nominal year of 2005 and applied the same 10-fold cross-validation analysis using data with and without anthropogenic C_T corrections. We found that the RMSE of the C_T model trained using measurements with anthropogenic corrections is $13.9 \mu\text{mol kg}^{-1}$, which is not significantly different from the model trained using measurements without anthropogenic corrections (Eq. 2; RMSE = $14.3 \mu\text{mol kg}^{-1}$).

The yearly increase of C_T concentrations is difficult to assess due to the wide spatial distribution of the training data set used to generate Eq. (2). Hence, we will refer to the monthly C_T concentrations measured between 1998 and 2013 at the DYFAMED time-series station. We found that the rate of increase in C_T concentrations at the DYFAMED site was $0.99 \mu\text{mol kg}^{-1} \text{yr}^{-1}$ (Fig. 3), which is consistent with the anthropogenic C_T correction rate used in the previous studies of Lee et al. (2000), Bates (2007), and Sasse et al. (2013).

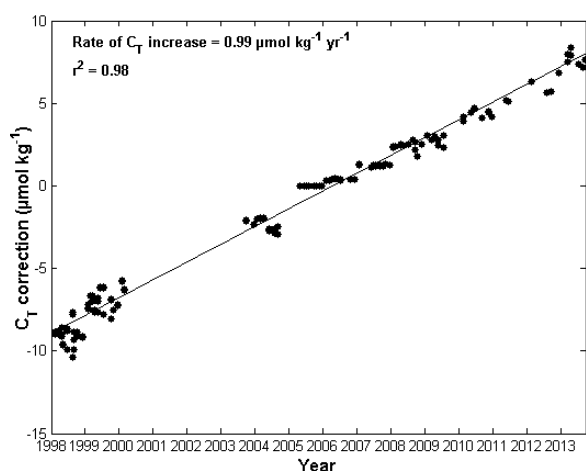


Figure 3. Rate of increase applied to correct the C_T measurements in reference to the year 2005.

The rate of increase in C_T concentrations of $0.99 \mu\text{mol kg}^{-1} \text{yr}^{-1}$ as well as the RMSE difference of $\pm 0.4 \mu\text{mol kg}^{-1}$ between the two models (with or without anthropogenic corrections) are both smaller than the uncertainty of the C_T measurements of at least $\pm 2 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (Millero, 2007). A recent study also showed that the uncertainty of the C_T measurements can be significantly higher than $\pm 2 \mu\text{mol kg}^{-1}$, as most laboratories reported values of C_T for the measures that were within a range of $\pm 10 \mu\text{mol kg}^{-1}$ of the stated value (Bockmon and Dickson, 2015).

Between 1998 and 2013, the C_T concentrations measured at the DYFAMED time-series station showed a slightly increasing trend ($r^2 = 0.05$). The increase in C_T concentrations in response to elevated atmospheric CO_2 was masked by the high seasonal variations. For example, during the year 1999 the variation in C_T concentrations reached as high as $100 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (Fig. 4a). Also, there is a clear seasonal cycle of C_T in the DYFAMED station (Fig. 4b). In the summer, the C_T starts to increase gradually, reaching a maximum of $2320 \mu\text{mol kg}^{-1}$ during the winter season, after which a gradual decrease is observed to reach a minimum of $2200 \mu\text{mol kg}^{-1}$ by the end of spring. The seasonal cycle can be explained by the counter effect of temperature and biology on the C_T variations. During the spring, the increasing effect of warming of pCO_2 is counteracted by the photosynthetic activity that lowers the C_T . During the winter, the decreasing effect of cooling on pCO_2 is counteracted by the upwelling of deep waters rich in C_T (Hood and Merlivat, 2001; Takahashi et al., 1993). This shows that the C_T concentrations were more affected by the seasonal variations than by anthropogenic forcing.

Considering the small differences in the RMSE obtained by the two models, the uncertainties in the C_T measurements,

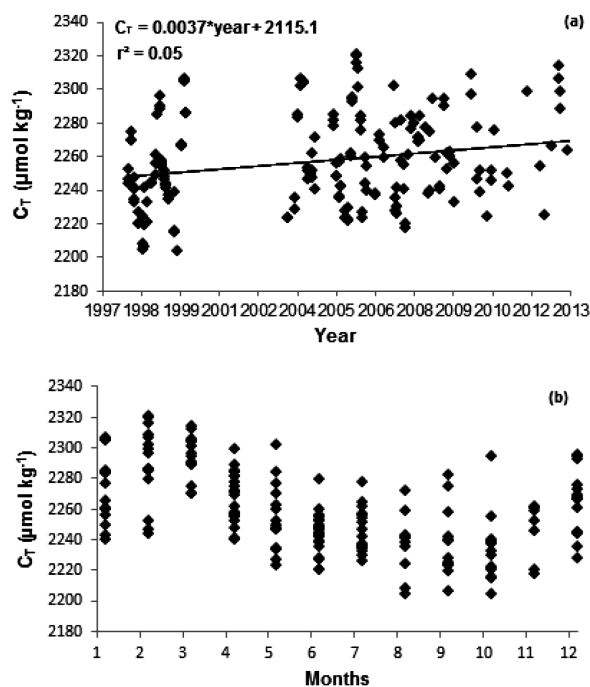


Figure 4. (a) Temporal and (b) seasonal variations of C_T measured at the DYFAMED time-series station between 1998 and 2013.

and the clear signal of the seasonal variations, no corrections were made to account for the rising atmospheric CO_2 concentrations. Also, the dynamic overturning circulation in the Mediterranean Sea plays an effective role in absorbing the anthropogenic CO_2 and transports it from the surface to the interior of the basins (Hassoun et al., 2015a; Lee et al., 2011).

The residuals of the data set used to generate the third-order polynomial fit for C_T are presented in Fig. 5a. Most of the C_T residuals (330 out of 360) were within a range of $\pm 18 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ). In contrast, only few residuals (12 out of 360) reached up to $\pm 50 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ). Applying the C_T algorithm to the testing data set (Fig. 5b) yields a mean residual of $4.5 \pm 17 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ), which is close to the uncertainties of our C_T relationship. The high residuals observed in this study are consistent with the results of the optimal multiple linear regression performed by Lovato and Vichi (2015), where the largest discrepancies between observations and reconstructed data were detected at the surface layer with RMSE higher than $\pm 20 \mu\text{mol kg}^{-1}$. To make sure that the C_T algorithm does not overfit the data, we conducted the same analysis performed on the A_T data sets. The results show that for both the RMSE and mean residual we cannot reject the null hypothesis (that assumes equals means) between the training and validation data sets (Table 4).

Considering the high uncertainties of the C_T measurements, the seasonal variations, and the anthropogenic forcing, Eq. (2) presents the first parameterization for C_T in

Table 4. Mean difference t test for the C_T algorithm between the training and validation data sets

	Training data set	Validation data set	
RMSE ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	14.3	16.2	Mean difference t test: $H = 0; p = 0.04$
Mean residual ($\mu\text{mol kg}^{-1}$)	$-1.5 \times 10^{-12} \pm 14.2$	4.5 ± 17	Mean difference t test: $H = 0; p = 0.06$

the Mediterranean Sea surface waters, with an RMSE of $\pm 14.3 \mu\text{mol kg}^{-1}$ (1σ) and a $r^2 = 0.90$ (Eq. 2).

3.3 Spatial and seasonal variability of A_T and C_T in surface waters

The ranges of the 2005–2012 average annual climatologies of WOA13 are from 35.91 to 39.50 for S and from 16.50 to 23.57 °C for T (Locarnini et al., 2013; Zweng et al., 2013). However, a wider range is observed for the seasonal climatologies, especially during the winter season where T ranges from 9.05 to 18.43 °C. The estimations of A_T and C_T in surface waters from Eq. (1) and (2) respectively are only applicable in the appropriate ranges of $T > 13$ °C and $36.3 < S < 39.65$. Hence, the surface water's A_T and C_T concentrations were mapped only where T and S were within the validity range of Eq. (1) and (2) respectively. Excluding few near-shore areas and the influence of cold Atlantic waters in winter, the ranges in which Eq. (1) and Eq. (2) can be applied are within those of the climatological products of T and S of the WOA13 (Fig. 6).

The mapped climatologies for 2005–2012 at 5m depth show a strong increase in the eastward gradient for both A_T and C_T with the highest concentrations always found in the eastern Mediterranean (Fig. 7). The minimum values of $2400 \mu\text{mol kg}^{-1}$ for A_T and $2100 \mu\text{mol kg}^{-1}$ for C_T are found near the Strait of Gibraltar and the maximum values of $2650 \mu\text{mol kg}^{-1}$ and $2300 \mu\text{mol kg}^{-1}$ are found in the Levantine and Aegean sub-basins for A_T and C_T respectively.

The A_T parameterization of this study detects a clear signature of the alkaline waters entering through the Strait of Gibraltar that remains traceable to the Strait of Sicily as also shown by Cossarini et al. (2015). In the eastern basin the positive balance between evaporation and precipitation contributes to the increasing surface A_T . Local effects from some coastal areas such as the Gulf of Gabes and riverine inputs from the Rhone and Po rivers are also detected.

Our results for surface A_T have a similar spatial pattern and range as the annual climatology of Cossarini et al. (2015) which simulates surface A_T values from 2400 to $2700 \mu\text{mol kg}^{-1}$. The main difference is marked in the upper ends of the Adriatic and Aegean sub-basins where our algorithm predicts A_T values around 2400 – $2500 \mu\text{mol kg}^{-1}$, whereas the analysis of Cossarini et al. (2015) yields a maximum of $2700 \mu\text{mol kg}^{-1}$ in these regions. Regressions in

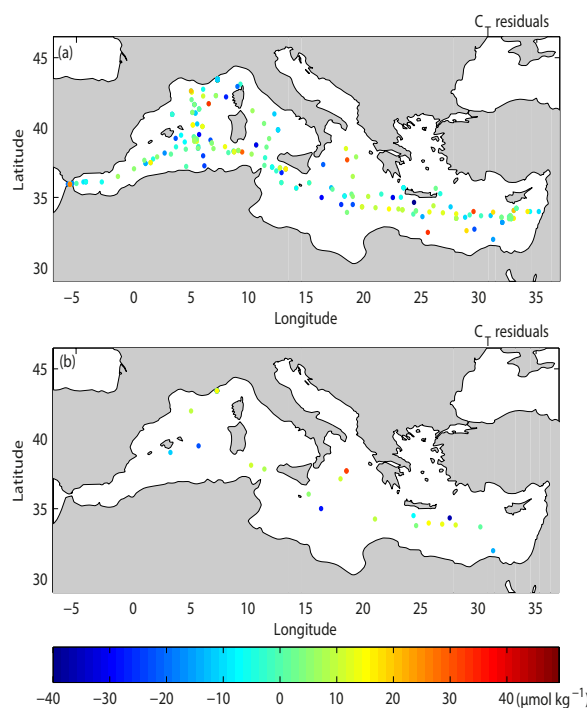


Figure 5. Comparison of the predicted C_T values from the C_T algorithm given in Eq. (2) with measurements which are (a) included or (b) excluded when deriving the fit.

regions of high alkaline riverine inputs indicate a negative correlation between alkalinity and salinity (Luchetta et al., 2010). Hence, eastern marginal seas such as the Adriatic and Aegean sub-basins have high A_T concentrations due to the freshwater inputs having enhanced alkalinity loads (Cantoni et al., 2012; Souvermezoglou et al., 2010). This shows the sensitivity of our algorithms to temperature and salinity especially in areas that are more influenced by continental inputs such as the Po and other local rivers in the northern Adriatic and inputs of the brackish Black Sea water through the Dardanelles Strait as well as by the river runoff from the Greek and Turkish mainland in the northern Aegean (Fig. 7a).

At the surface, the basin-wide distributions of C_T are affected by physical processes and their gradient is similar to that of A_T (Fig. 7b). The lowest C_T concentrations are found

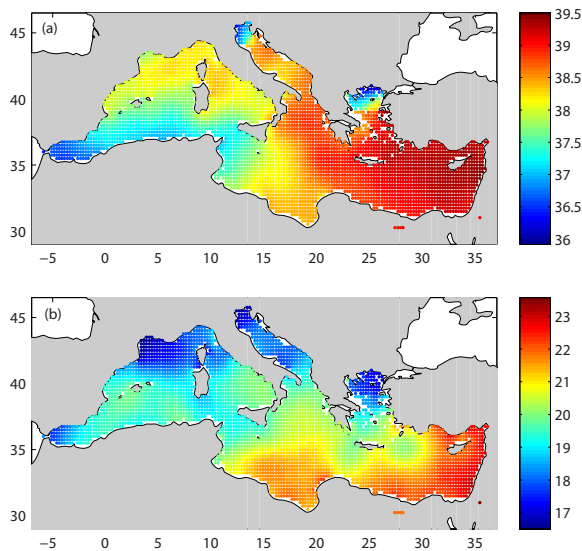


Figure 6. The 7-year averages (2005–2012) of (a) sea surface salinity and (b) sea surface temperature climatological fields of the WOA13 (Locarnini et al., 2013; Zweng et al., 2013).

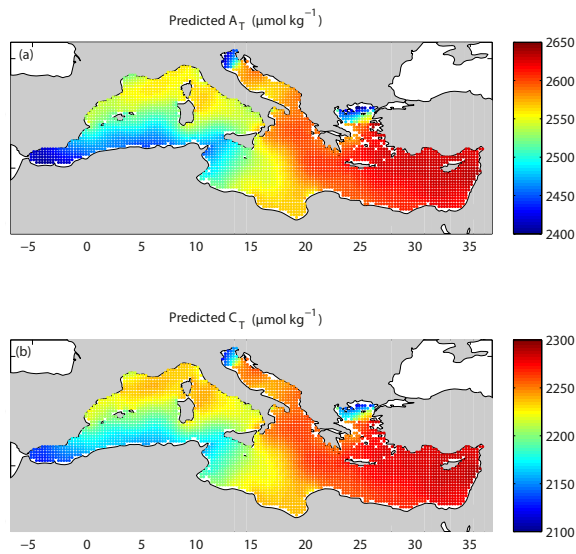


Figure 7. The 7-year averages of spatial variability for (a) surface A_T predicted from Eq. (1) and (b) surface C_T predicted from Eq. (2), applied to the 2005–2012 climatological fields of S and T from the WOA13.

in the zone of the inflowing Atlantic water and increases toward the east in part due to evaporation as also shown by Schneider et al. (2010). Our results for surface C_T have a similar range as the optimal linear regression performed by Lovato and Vichi (2015) which estimates surface C_T values

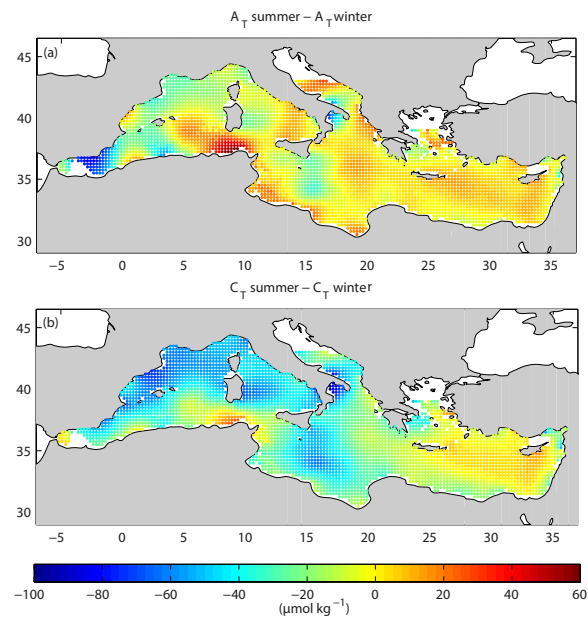


Figure 8. Distribution of the summer–winter differences of (a) surface A_T predicted from Eq. (1) and (b) surface C_T predicted from Eq. (2), applied to the 2005–2012 climatological fields of S and T from the WOA13.

from 2180 to 2260 $\mu\text{mol kg}^{-1}$. Moreover, the results show that the Mediterranean Sea is characterized by C_T values that are much higher (100–200 $\mu\text{mol kg}^{-1}$ higher) than those observed in the Atlantic Ocean at the same latitude (Key et al., 2004).

Overall, the western basin has a lower surface C_T content than the eastern basin, which could be explained by the eastward decrease of the Mediterranean Sea trophic gradient (Lazzari et al., 2012). The higher rate of inorganic carbon consumption by photosynthesis in the western basin can lead to the depletion of C_T in the surface waters, whereas the ultra-oligotrophic state in the eastern basin can lead to a high remineralization rate that consumes oxygen and enriches surface waters with C_T (Moutin and Raimbault, 2002).

The magnitude of the seasonal variability between summer and winter for A_T and C_T is shown in Fig. 8. Unlike the 7-year averages, the seasonal climatological variations (2005–2012) of A_T have different spatial patterns than those of C_T . Overall the summer–wintertime differences for A_T have an increasing eastward gradient (Fig. 8a). The largest magnitudes are marked in the Alboran Sea with differences reaching up to $-80 \mu\text{mol kg}^{-1}$; the negative difference implies that during the winter inflowing surface Atlantic water has higher A_T concentrations than in summer. Higher wintertime than summertime A_T concentrations are also observed in the Balearic, Ligurian and the south-western Ionian sub-basins but with a less-pronounced

seasonality ($\sim -30 \mu\text{mol kg}^{-1}$). For these three sub-basins, the C_T has a higher summer–winter magnitude than A_T ($\sim -70 \mu\text{mol kg}^{-1}$). The winter cooling of surface waters increases their density and promotes a mixing with deeper water. Thus, the enrichment in wintertime likely reflects the upwelling of deep waters that have accumulated A_T and C_T from the remineralization of organic matter, respiration, and the dissolution of CaCO_3 . The seasonality is more pronounced for C_T , which likely reflects the stronger response of C_T to biological processes than A_T (Takahashi et al., 1993).

In the Algerian sub-basin and along the coasts of Tunisia and Libya, the seasonality is inverted with higher A_T and C_T concentrations prevailing in the summer. The African coast is an area of coastal downwelling during the winter season. However, during summer the coastal upwelling appears in response to turning of the wind near the coast toward the west (Bakun and Agostini, 2001). In general, the magnitude of the A_T seasonal variability is higher in summer than in winter for the eastern basin and more particularly in the Ionian and Levantine sub-basins. During this season, strong evaporation takes place, which induces an increase of A_T concentrations (Schneider et al., 2007). In the eastern basin, the high evaporation during the summer has a smaller effect on the C_T , and magnitudes reach their maxima in the Levantine sub-basin ($\sim +20 \mu\text{mol kg}^{-1}$). During wintertime the western basin and the south-east of Sicily appear to be dominated by higher C_T concentrations than the rest of the eastern basin, where the summer C_T concentrations prevail (Fig. 8b). During winter the high C_T concentrations that coincide with low sea surface temperature in the western basin could result from the deepening of the mixed layer and could be enhanced by the upwelling associated with the Tramontane–Mistral winds that blow from the south of France and reach the Balearic Islands and the Spanish coast.

4 Summary

The A_T and C_T algorithms are derived from a compilation of 490 and 426 quality controlled surface measurements respectively, collected between 1999 and 2013 in the Mediterranean Sea. A second-order polynomial relating A_T to both S and T yielded a lower RMSE ($\pm 10.4 \mu\text{mol kg}^{-1}$) and a higher r^2 (0.96) than a linear fit deriving A_T from S alone. This confirmed the important contribution of temperature to the A_T variability. Hence, temperature should be included in future algorithms to help better constrain the surface A_T variations. The proposed second-order polynomial had a lower RMSE than other studies when we applied their respective algorithms to the same training data set. In this study we propose an improved and more global relationship to estimate the A_T spatial and temporal variations in the Mediterranean Sea surface waters.

The C_T parameterization is a first attempt to estimate the surface variations in the Mediterranean Sea. A third-order

polynomial is suggested to fit the C_T to T and S with a RMSE of $\pm 14.3 \mu\text{mol kg}^{-1}$. The biological contributions to the C_T variations were less pronounced than the physical processes. The contributions of to the physical processes and biology to the C_T variability were 90 and 10 % respectively. In terms of anthropogenic forcing, the C_T rate of increase of $0.99 \mu\text{mol kg}^{-1} \text{yr}^{-1}$ was significantly lower than the uncertainty of the measurements than can reach $\pm 10 \mu\text{mol kg}^{-1}$ between different laboratories. Moreover, the C_T concentrations were more affected by the seasonal variations than the increase of atmospheric CO_2 .

We propose to use Eqs. (1) and (2) for the estimation of surface A_T and C_T in the Mediterranean Sea when salinity and temperature of the area are available and are in the appropriate ranges of the equations. However, in the eastern marginal seas, especially the northern Adriatic and northern Aegean, there is a need to develop a more specific equation that minimizes the errors in these areas. Hence, it is important to enrich the existing data set by an extensive sampling program such as the Med-SHIP initiative (CIESM, 2012) in order to improve the modelling of the carbonate system over the whole Mediterranean Sea.

Acknowledgements. The authors would like to thank all parties that have contributed to the data provision.

- The Sesame IT4 and Moose-GE cruise data were provided through SeaDataNet – Pan-European infrastructure for ocean and marine data management (<http://www.seadatanet.org>).
- The DYFAMED time series have been provided by the Oceanological Observatory of Villefranche-sur-Mer (L. Coppola). This project is funded by CNRS-INSU and ALLENVI through the MOOSE observing network.
- The Transmed cruise data were provided by P. Rivaro, A. Russo, and V. Kovacevic. The Transmed cruise is part of the VECTOR project, funded by the Ministry of Education, University and Research, the Ministry of Economy and Finance, the Ministry of the Environment and Protection of Natural Resources, and the Ministry of Agriculture and Forestry with an Integrated Special Fund for Research (FISR).
- The MedSEA 2013 cruise data were provided by the University of Perpignan Via Domitia, Institut de Modélisation et d'Analyse en Géo-Environnements et Santé, ESPACE-DEV (C. Goyet and A. E. R. Hassoun). This project was funded by the EC Mediterranean Sea Acidification in a changing climate project (MedSeA; grant agreement 265103).
- We would also like to thank the SNAPO- CO_2 (Service National d'Analyse des paramètres Océaniques du CO_2) for their contribution in measuring some of the A_T and C_T samples.

The authors are also grateful to the National Council for Scientific Research (CNRS) in Lebanon for the PhD thesis scholarship granted to Gemayel Elissar.

Edited by: C. Heinze

References

- Álvarez, M., Sanleón-Bartolomé, H., Tanhua, T., Mintrop, L., Luchetta, A., Cantoni, C., Schroeder, K., and Civitarese, G.: The CO₂ system in the Mediterranean Sea: a basin wide perspective, *Ocean Sci.*, 10, 69–92, 2014, <http://www.ocean-sci.net/10/69/2014/>.
- Bakker, D. C. E., de Baar, H. J. W., and de Jong, E.: The dependence on temperature and salinity of dissolved inorganic carbon in East Atlantic surface waters, *Mar. Chem.*, 65, 263–280, 1999.
- Bakun, A. and Agostini, V. N.: Seasonal patterns of wind-induced upwelling/downwelling in the Mediterranean Sea, *Sci. Mar.*, 65, 243–257, 2001.
- Bates, N. R.: Interannual variability of the oceanic CO₂ sink in the subtropical gyre of the North Atlantic Ocean over the last 2 decades, *J. Geophys. Res.*, 112, C09013, doi:10.1029/2006jc003759, 2007.
- Bates, N. R., Pequignet, A. C., and Sabine, C. L.: Ocean carbon cycling in the Indian Ocean: 1. Spatiotemporal variability of inorganic carbon and air-sea CO₂ gas exchange, *Global Biogeochem. Cy.*, 20, GB3020, doi:10.1029/2005GB002491, 2006.
- Bégovic, M. and Copin-Montégut, C.: Processes controlling annual variations in the partial pressure of CO₂ in surface waters of the central northwestern Mediterranean Sea (Dyfamed site), *Deep Sea Res. Part II Top Stud. Oceanogr.*, 49, 2031–2047, 2002.
- Bégovic, M. and Copin, C.: Alkalinity and pH measurements on water bottle samples during THALASSA cruise PROSOPE, available at: <http://doi.pangaea.de/10.1594/PANGAEA.805265> (last access: 20 August 2015), 2013.
- Bockmon, E. E. and Dickson, A. G.: An inter-laboratory comparison assessing the quality of seawater carbon dioxide measurements, *Mar. Chem.*, 171, 36–43, 2015.
- Breiman, L.: Stacked regressions, *Mach. Learn.*, 24, 49–64, 1996.
- Cantoni, C., Luchetta, A., Celio, M., Cozzi, S., Raicich, F., and Catalano, G.: Carbonate system variability in the Gulf of Trieste (North Adriatic Sea), *Estuar. Coast. Shelf Sci.*, 115, 51–62, 2012.
- CIESM: Designing Med-SHIP: a Program for repeated oceanographic surveys, CIESM, Monaco, 164 pp., 2012.
- Copin-Montégut, C.: Alkalinity and carbon budgets in the Mediterranean Sea, *Global Biogeochem. Cy.*, 7, 915–925, 1993.
- Copin-Montégut, C. and Bégovic, M.: Distributions of carbonate properties and oxygen along the water column (0–2000m) in the central part of the NW Mediterranean Sea (Dyfamed site): influence of winter vertical mixing on air–sea CO₂ and O₂ exchanges, *Deep Sea Res. Part II Top Stud. Oceanogr.*, 49, 2049–2066, 2002.
- Cossarini, G., Lazzari, P., and Solidoro, C.: Spatiotemporal variability of alkalinity in the Mediterranean Sea, *Biogeosciences*, 12, 1647–1658, doi:10.5194/bg-12-1647-2015, 2015.
- D’Ortenzio, F., Antoine, D., and Marullo, S.: Satellite-driven modeling of the upper ocean mixed layer and air–sea CO₂ flux in the Mediterranean Sea, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 55, 405–434, 2008.
- Goyet, C. and Davis, D.: Estimation of total CO₂ concentration throughout the water column, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 44, 859–877, 1997.
- Goyet, C., Hassoun, A. E. R., and Gemayel, E.: Carbonate system during the May 2013 MedSeA cruise, PANGAEA, available at: <http://doi.pangaea.de/10.1594/PANGAEA.841933> (last access: 20 August 2015), 2015.
- Hassoun, A. E. R., Gemayel, E., Krasakopoulou, E., Goyet, C., Abboud-Abi Saab, M., Guglielmi, V., Touratier, F., and Falco, C.: Acidification of the Mediterranean Sea from anthropogenic carbon penetration, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 102, 1–15, 2015a.
- Hassoun, A. E. R., Gemayel, E., Krasakopoulou, E., Goyet, C., Abboud-Abi Saab, M., Ziveri, P., Touratier, F., Guglielmi, V., and Falco, C.: Modeling of the total alkalinity and the total inorganic carbon in the Mediterranean Sea, *J. Water Resour. Ocean. Sci.*, 4, 24–32, 2015b.
- Hood, E. M. and Merlivat, L.: Annual to interannual variations of fCO₂ in the northwestern Mediterranean Sea: Results from hourly measurements made by CARIOCA buoys, 1995–1997, *J. Mar. Res.*, 59, 113–131, 2001.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Al Amir Moulay Abdallah cruise CARBOGIB-2, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618899, 2007a.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Al Amir Moulay Abdallah cruise CARBOGIB-3, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618898, 2007b.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Al Amir Moulay Abdallah cruise CARBOGIB-4, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618897, 2007c.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Al Amir Moulay Abdallah cruise CARBOGIB-5, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618896, 2007d.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Al Amir Moulay Abdallah cruise CARBOGIB-6, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618895, 2007e.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Garcia del Cid cruise GIFT-1, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618816, 2007f.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Garcia del Cid cruise GIFT-2, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618815, 2007g.
- Huertas, E.: Hydrochemistry measured on water bottle samples during Garcia del Cid cruise GIFT-3, Unidad de Tecnología Marina – Consejo Superior de Investigaciones Científicas, doi:10.1594/PANGAEA.618815, 2007h.
- Hydes, D., Jiang, Z., Hartman, M. C., Campbell, J. M., Hartman, S. E., Pagnani, M. R., and Kelly-Gerrey, B. A.: Surface DIC and TALK measurements along the M/V Pacific Celebes VOS Line during the 2007–2012 cruises. available at: http://cdiac.ornl.gov/ftp/oceans/VOS_Pacific_Celebes_line/ (last access: 20 August 2015). Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee, doi:10.3334/CDIAC/OTG.VOS_PC_2007-2012, 2012.
- Ishii, M., Saito, S., Tokieda, T., Kawano, T., Matsumoto, K., and Inoue, H. Y.: Variability of surface layer CO₂ parameters in the Western and Central Equatorial Pacific. In: *Global Environmental Change in the Ocean and on Land*, edited by: Shiyomi M.,

- Koizumi, K. H., Tsuda, A., Awaya, Y., TERRAPUB, Tokyo, 2004.
- Jiang, Z.-P., Tyrrell, T., Hydes, D. J., Dai, M., and Hartman, S. E.: Variability of alkalinity and the alkalinity-salinity relationship in the tropical and subtropical surface ocean, *Global Biogeochem. Cy.*, 28, 729–742, doi:10.1002/2013gb004678, 2014.
- Keeling, R. F., Najjar, R. P., Bender, M. L., and Tans, P. P.: What atmospheric oxygen measurements can tell us about the global carbon cycle, *Global Biogeochem. Cy.*, 7, 37–67, 1993.
- Key, R. M., Kozyr, A., Sabine, C. L., Lee, K., Wanninkhof, R., Bullister, J. L., Feely, R. A., Millero, F. J., Mordy, C., and Peng, T. H.: A global ocean carbon climatology: Results from Global Data Analysis Project (GLODAP), *Global Biogeochem. Cy.*, 18, GB4031, doi:10.1029/2004gb002247, 2004.
- Koeve, W., Duteil, O., Oschlies, A., Kähler, P., and Segschneider, J.: Methods to evaluate CaCO₃ cycle modules in coupled global biogeochemical ocean models, *Geosci. Model Dev.*, 7, 2393–2408, doi:10.5194/gmd-7-2393-2014, 2014.
- Koffi, U., Lefèvre, N., Kouadio, G., and Boutin, J.: Surface CO₂ parameters and air–sea CO₂ flux distribution in the Eastern Equatorial Atlantic Ocean, *J. Mar. Syst.*, 82, 135–144, 2010.
- Krasakopoulou, E., Souvermezoglou, E., and Goyet, C.: Anthropogenic CO₂ fluxes in the Otranto Strait (E. Mediterranean) in February 1995, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 58, 1103–1114, 2011.
- Lazzari, P., Solidoro, C., Ibello, V., Salon, S., Teruzzi, A., Béranger, K., Colella, S., and Crise, A.: Seasonal and inter-annual variability of plankton chlorophyll and primary production in the Mediterranean Sea: a modelling approach, *Biogeosciences*, 9, 217–233, doi:10.5194/bg-9-217-2012, 2012.
- Lee, K., Wanninkhof, R., Feely, R. A., Millero, F. J., and Peng, T.-H.: Global relationships of total inorganic carbon with temperature and nitrate in surface seawater, *Global Biogeochem. Cy.*, 14, 979–994, 2000.
- Lee, K., Tong, L. T., Millero, F. J., Sabine, C. L., Dickson, A. G., Goyet, C., Park, G.-H., Wanninkhof, R., Feely, R. A., and Key, R. M.: Global relationships of total alkalinity with salinity and temperature in surface waters of the world's oceans, *Geophys. Res. Lett.*, 33, L19605, doi:10.1029/2007gl027207, 2006.
- Lee, K., Sabine, C. L., Tanhua, T., Kim, T.-W., Feely, R. A., and Kim, H.-C.: Roles of marginal seas in absorbing and storing fossil fuel CO₂, *Energ. Environ. Sci.*, 4, 1133–1146, 2011.
- Locarnini, R. A., Mishonov, A. V., Antonov, J. I., Boyer, T. P., Garcia, H. E., Baranova, O. K., Zweng, M. M., Paver, C. R., Reagan, J. R., Johnson, D. R., Hamilton, M., and Seidov, D.: *World Ocean Atlas 2013, Volume 1: Temperature*, NOAA Atlas NESDIS 73, 40 pp., 2013.
- Louanchi, F., Boudjadjji, M., and Nacef, L.: Decadal changes in surface carbon dioxide and related variables in the Mediterranean Sea as inferred from a coupled data-diagnostic model approach, *ICES J Mar Sci*, 66, 1538–1546, 2009.
- Lovato, T. and Vichi, M.: An objective reconstruction of the Mediterranean sea carbonate system, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 98, 21–30, 2015.
- Luchetta, A., Cantoni, C., and Catalano, G.: New observations of CO₂ induced acidification in the northern Adriatic Sea over the last quarter century, *Chem Ecol*, 26, 1–17, 2010.
- McNeil, B. I., Metzl, N., Key, R. M., Matear, R. J., and Corbiere, A.: An empirical estimate of the Southern Ocean air–sea CO₂ flux, *Global Biogeochem. Cy.*, 21, GB3011, doi:10.1029/2007gb002991, 2007.
- Millero, F. J.: The Marine inorganic carbon cycle, *Chem. Rev.*, 107, 308–341, 2007.
- Millero, F. J., Lee, K., and Roche, M.: Distribution of alkalinity in the surface waters of the major oceans, *Mar. Chem.*, 60, 111–130, 1998.
- Moutin, T. and Raimbault, P.: Primary production, carbon export and nutrients availability in Western and Eastern Mediterranean Sea in early summer 1996 (MINOS cruise), *J. Mar. Syst.*, 33–34, 273–288, 2002.
- Omta, A. W., Dutkiewicz, S., and Follows, M. J.: Dependence of the ocean-atmosphere partitioning of carbon on temperature and alkalinity, *Global Biogeochem. Cy.*, 25, GB1003, doi:10.1029/2010gb003839, 2011.
- Perez, F. F., Rios, A. F., Pelegri, J. L., de la Paz, M., Alonso, F., Royo, E., Velo, A., Garcia-Ibanez, M., and Padin, X. A.: Carbon Data Obtained During the R/V Hesperides Cruise in the Atlantic Ocean on CLIVAR Repeat Hydrography Section A17, FICARAM XV, (20 March–2 May 2013). http://cdiac.ornl.gov/ftp/oceans/CLIVAR/A17_FICARAM_XV_2013/. Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee, doi:10.3334/CDIAC/OTG.CLIVAR_FICARAM_XV, 2013.
- Poisson, A., Metzl, N., Brunet, C., Schauer, B., Bres, B., Ruiz-Pino, D., and Louanchi, F.: Variability of sources and sinks of CO₂ in the western Indian and southern oceans during the year 1991, *J. Geophys. Res.*, 98, 22759–22778, 1993.
- Rivaro, P., Messa, R., Massolo, S., and Frache, R.: Distributions of carbonate properties along the water column in the Mediterranean Sea: Spatial and temporal variations, *Mar. Chem.*, 121, 236–245, 2010.
- Rödenbeck, C., Keeling, R. F., Bakker, D. C. E., Metzl, N., Olsen, A., Sabine, C., and Heimann, M.: Global surface-ocean pCO₂ and sea–air CO₂ flux variability from an observation-driven ocean mixed-layer scheme, *Ocean Sci.*, 9, 193–216, 2013, <http://www.ocean-sci.net/9/193/2013/>.
- Rohling, E. J., Abu-Zied, R. H., Casford, J. S. L., Hayes, A., and Hoogakker, B. A. A.: The marine environment: Present and past, in: *The physical geography of the Mediterranean*, edited by: Woodward, J. C., Oxford University Press, 33–67, 2009.
- Sabine, C. L., Feely, R. A., Gruber, N., Key, R. M., Lee, K., Bullister, J. L., Wanninkhof, R., Wong, C. S., Wallace, D. W. R., Tilbrook, B., Millero, F. J., Peng, T.-H., Kozyr, A., Ono, T., and Rios, A. F.: The oceanic sink for anthropogenic CO₂, *Science*, 305, 367–371, 2004.
- Santana-Casiano, J. M., Gonzalez-Davila, M., and Laglera, L. M.: The carbon dioxide system in the Strait of Gibraltar, *Deep Sea Res. Part II Top Stud Oceanogr.*, 49, 4145–4161, 2002.
- Sasse, T. P., McNeil, B. I., and Abramowitz, G.: A novel method for diagnosing seasonal to inter-annual surface ocean carbon dynamics from bottle data using neural networks, *Biogeosciences*, 10, 4319–4340, doi:10.5194/bg-10-4319-2013, 2013.
- Schneider, A., Wallace, D. W. R., and Körtzinger, A.: Alkalinity of the Mediterranean Sea, *Geophys. Res. Lett.*, 34, L15608, doi:10.1029/2010jc006171, 2007.
- Schneider, A., Tanhua, T., Körtzinger, A., and Wallace, D. W. R.: High anthropogenic carbon content in the

- Eastern Mediterranean, *J. Geophys. Res.*, 115, C12050, doi:10.1029/2006gl028842, 2010.
- Schneider, B. and Roether, W.: Meteor 06MT20011018 cruise data from the 2001 cruises, CARINA Data Set, available at: <http://cdiac.ornl.gov/ftp/oceans/CARINA/Meteor/06MT512/> (last access: 11 December 2015), Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee, doi:10.3334/CDIAC/otg.CARINA06MT20011018, 2007.
- Souvermezoglou, E., Krasakopoulou, E., and Goyet, C.: Total inorganic carbon and total alkalinity distribution in the Aegean Sea, *CIESM*, 312 pp., 2010.
- Stone, M.: Cross validatory choice and assessment of statistical predictions, *J. R. Stat. Soc. B-Stat. Methodol.*, 36, 111–147, 1974.
- Takahashi, T., Olafsson, J., Goddard, J. G., Chipman, D. W., and Sutherland, S. C.: Seasonal variation of CO₂ and nutrients in the high-latitude surface oceans: A comparative study, *Global Biogeochem. Cy.*, 7, 843–878, 1993.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Wanninkhof, R., Sweeney, C., Feely, R. A., Chipman, D. W., Hales, B., Friederich, G., Chavez, F., Sabine, C., Watson, A., Bakker, D. C. E., Schuster, U., Metzl, N., Yoshikawa-Inoue, H., Ishii, M., Midorikawa, T., Nojiri, Y., Körtzinger, A., Steinhoff, T., Hoppema, M., Olafsson, J., Arnarson, T. S., Tilbrook, B., Johannessen, T., Olsen, A., Bellerby, R., Wong, C. S., Delille, B., Bates, N. R., and de Baar, H. J. W.: Climatological mean and decadal change in surface ocean pCO₂, and net sea–air CO₂ flux over the global oceans, *Deep Sea Res. Part II Top Stud. Oceanogr.*, 56, 554–577, 2009.
- Takahashi, T., Sutherland, S. C., Chipman, D. W., Goddard, J. G., Ho, C., Newberger, T., Sweeney, C., and Munro, D. R.: Climatological distributions of pH, pCO₂, total CO₂, alkalinity, and CaCO₃ saturation in the global surface ocean, and temporal changes at selected locations, *Mar. Chem.*, 164, 95–125, 2014.
- Tanhua, T., Alvarez, M., and Mintrop, L.: Carbon dioxide, hydrographic, and chemical data obtained during the R/V Meteor MT84_3 Mediterranean Sea cruise (5–28 April 2011), available at: http://cdiac.ornl.gov/ftp/oceans/CLIVAR/Met_84_3_Med_Sea/ (last access: 20 August 2015), Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory, US Department of Energy, Oak Ridge, Tennessee, doi:10.3334/CDIAC/OTG.CLIVAR_06MT20110405, 2012.
- Touratier, F. and Goyet, C.: Decadal evolution of anthropogenic CO₂ in the northwestern Mediterranean Sea from the mid-1990s to the mid-2000s, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 56, 1708–1716, 2009.
- Touratier, F. and Goyet, C.: Impact of the Eastern Mediterranean Transient on the distribution of anthropogenic CO₂ and first estimate of acidification for the Mediterranean Sea, *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.*, 58, 1–15, 2011.
- Touratier, F., Guglielmi, V., Goyet, C., Prieur, L., Pujo-Pay, M., Conan, P., and Falco, C.: Distributions of the carbonate system properties, anthropogenic CO₂, and acidification during the 2008 BOUM cruise (Mediterranean Sea), *Biogeosciences Discuss.*, 9, 2709–2753, doi:10.5194/bgd-9-2709-2012, 2012.
- Wanninkhof, R., Park, G. H., Takahashi, T., Sweeney, C., Feely, R., Nojiri, Y., Gruber, N., Doney, S. C., McKinley, G. A., Lenton, A., Le Quéré, C., Heinze, C., Schwinger, J., Graven, H., and Khatiwala, S.: Global ocean carbon uptake: magnitude, variability and trends, *Biogeosciences*, 10, 1983–2000, doi:10.5194/bg-10-1983-2013, 2013.
- Watson, A. and Orr, J.: Carbon Dioxide Fluxes in the Global Ocean. In: *Ocean Biogeochemistry*, edited by: Fasham, M. R., *Global Change — The IGBP Series (closed)*, Springer Berlin Heidelberg, 123–143, 2003.
- Zweng, M. M., Reagan, J. R., Antonov, J. I., Locarnini, R. A., Mishonov, A. V., Boyer, T. P., Garcia, H. E., Baranova, O. K., Johnson, D. R., Seidov, D., and Biddle, M. M.: *World Ocean Atlas 2013, Volume 2: Salinity*, edited by: Levitus, S., and Mishonov, A., NOAA Atlas NESDIS 74, 39 pp., 2013.

A.2.4 Evolution of the human impact on oceans

- **Journal** : Springer ed.
- **Contribution à un livre en cour de rédaction** : Co-viability of Social and Ecological Systems : Reconnect Man to the Biosphere in an Era of Global Change.
- **Etat** : En cour de rédaction/ correction

Evolution of the human impact on oceans

Catherine Goyet¹ Mohamed Anis Benallal² Amandine Bijoux³
 Véronique Guglielmi⁴ Moussa Hadjer⁵ Anne-Cécile Ribou⁶
 Franck Touratier⁷

CONTRIBUTED VOLUME / Springer ed.

Contribution to :
 Co-viability of Social and Ecological Systems: Reconnect Man to the
 Biosphere in an Era of Global Change

¹ Oceanographer, Professor of oceanography, IMAGES laboratory, UMR ESPACE-DEV, Perpignan University, Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : cgoyet@univ-perp.fr

² Computer scientist, Ph.D student, IMAGES laboratory, UMR ESPACE-DEV, Perpignan University, Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : mohamed.benallal@univ-perp.fr

³ Chemist, Ph.D student, OBS-Banyuls, Quai Racovizta, 66650 Banyuls-sur-Mer, France, email : bijoux@obs-banyuls.fr

⁴ Digital processing, Professor associate, IMAGES laboratory, UMR ESPACE-DEV, université de Perpignan Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : veronique.guglielmi@univ-perp.fr

⁵ Computer scientist, Ph.D student, IMAGES laboratory, UMR ESPACE-DEV, Perpignan University, Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : hadjer.moussa@univ-perp.fr

⁶ Environmental Chemistry, Professor associate, IMAGES, UMR ESPACE-DEV, université de Perpignan Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : ribou@univ-perp.fr

⁷ Oceanographer, Professor associate, IMAGES, UMR ESPACE-DEV, université de Perpignan Via Domitia, 52 avenue Paul Alduy, 66860 Perpignan, France, email : touratier@univ-perp.fr

Abstract

Since an important degree of the carbon dioxide (CO₂) that mankind emits in the atmosphere ends up in the ocean as a result of gas exchange through the air-sea interface, the ocean acidifies itself (because of the reaction CO₂ produces when it contacts water). Ocean acidification is one of the perturbing anthropogenic effects (because of human activity), not only for maritime ecosystems but also for Man himself as he will have to adapt. He will have to deal with variations in fisheries and other costal touristic activities (reduction of corals, and so on). However, the CO₂ anthropogenic penetration in the ocean is not uniform, and the cold Polar Regions will be affected by the change faster than the warm tropical regions. The study that we are conducting addresses several points of the quantification, in time and space, of CO₂ anthropogenic penetration in the ocean. One of them has permitted the identification of breaking points. We demonstrate that four points of rupture can be located in order to quantify risks of ocean acidification, which may have as a result the dissolution of calcium carbonates that are indispensable to maritime ecosystems (shells, corals, and so on). Thus, man will have to act rapidly to reduce deleterious effects and to find long-lasting solutions.

Annexe B

Équations des distributions latitudinales

Toutes les équations décrites dans cette annexe sont de la forme $Y = f(X)$, avec Y représentant le paramètre en question et X la latitude.

B.1 Température

R0 :	$Y = 0.7974X + 47.6378$	(B.1)
R0 – STZ :	$Y = 0.8491X + 50.1335$	(B.2)
R0 – SAZ :	$Y = 0.6355X + 40.1240$	(B.3)
R0 – PFZ :	$Y = 1.6059X + 89.9167$	(B.4)
R0 – POOZ :	$Y = 0.5183X + 31.0914$	(B.5)
R0 – SFZ :	$Y = 0.4090X + 24.4630$	(B.6)
R0 – CAZ :	$Y = 0.2926X + 17.6726$	(B.7)
R0 – SAR :	$Y = 0.8724X + 51.3946$	(B.8)
R0 – AR :	$Y = 0.4768X + 28.7107$	(B.9)
R2 :	$Y = 0.6874X + 44.1228$	(B.10)
R2 – STZ :	$Y = 1.1686X + 67.1934$	(B.11)
R2 – SAZ :	$Y = 0.6959X + 44.3753$	(B.12)
R2 – PFZ :	$Y = 1.2245X + 71.0686$	(B.13)
R2 – POOZ :	$Y = 0.2091X + 15.8246$	(B.14)
R2 – SFZ :	$Y = 0.4988X + 33.0076$	(B.15)
R2 – CAZ :	$Y = 0.8920X + 58.4180$	(B.16)
R2 – SAR :	$Y = 1.0390X + 61.3047$	(B.17)
R2 – AR :	$Y = 0.4367X + 28.9020$	(B.18)
R4 :	$Y = 0.7218X + 46.4143$	(B.19)
R4 – STZ :	$Y = 1.1764X + 68.2879$	(B.20)
R4 – SAZ :	$Y = 0.7926X + 49.5425$	(B.21)
R4 – PFZ :	$Y = 1.2496X + 72.9749$	(B.22)
R4 – POOZ :	$Y = 0.2568X + 18.8724$	(B.23)
R4 – SFZ :	$Y = 0.5121X + 34.3072$	(B.24)
R4 – CAZ :	$Y = 0.7632X + 49.4510$	(B.25)
R4 – SAR :	$Y = 1.0718X + 63.4884$	(B.26)
R4 – AR :	$Y = 0.4550X + 30.3138$	(B.27)

B.2 Salinité

R0 :	$Y = 0.0675X + 37.8258$	(B.28)
R0 – STZ :	$Y = 0.1333X + 40.9910$	(B.29)
R0 – SAZ :	$Y = 0.1144X + 40.1017$	(B.30)
R0 – PFZ :	$Y = 0.1219X + 40.4261$	(B.31)
R0 – POOZ :	$Y = -0.0035X + 33.6815$	(B.32)
R0 – SFZ :	$Y = -0.0075X + 33.4576$	(B.33)
R0 – CAZ :	$Y = -0.1578X + 23.7222$	(B.34)
R0 – SAR :	$Y = 0.1272X + 40.7203$	(B.35)
R0 – AR :	$Y = -0.0106X + 33.2761$	(B.36)
R2 :	$Y = 0.0577X + 37.2002$	(B.37)
R2 – STZ :	$Y = 0.1770X + 42.9633$	(B.38)
R2 – SAZ :	$Y = 0.1154X + 39.9329$	(B.39)
R2 – PFZ :	$Y = 0.0710X + 37.5223$	(B.40)
R2 – POOZ :	$Y = -0.0064X + 33.3522$	(B.41)
R2 – SFZ :	$Y = 0.0356X + 35.9103$	(B.42)
R2 – CAZ :	$Y = -0.0926X + 27.6492$	(B.43)
R2 – SAR :	$Y = 0.1531X + 41.8477$	(B.44)
R2 – AR :	$Y = 0.0010X + 33.7670$	(B.45)
R4 :	$Y = 0.0610X + 37.3223$	(B.46)
R4 – STZ :	$Y = 0.1574X + 42.0343$	(B.47)
R4 – SAZ :	$Y = 0.1273X + 40.4680$	(B.48)
R4 – PFZ :	$Y = 0.0871X + 38.3255$	(B.49)
R4 – POOZ :	$Y = -0.0077X + 33.2075$	(B.50)
R4 – SFZ :	$Y = -0.0058X + 33.3087$	(B.51)
R4 – CAZ :	$Y = -0.2665X + 16.0783$	(B.52)
R4 – SAR :	$Y = 0.1544X + 41.8664$	(B.53)
R4 – AR :	$Y = 0.0005X + 33.6832$	(B.54)

B.3 Alcalinité Totale

R0 :	$Y = 0.6909X + 2327.8373$	(B.55)
ou bien R0 :	$Y = 0,3549X^2 + 38,64X + 3331$	(B.56)
R0 – STZ :	$Y = 7.6100X + 2654.3448$	(B.57)
R0 – SAZ :	$Y = 5.7139X + 2571.5975$	(B.58)
R0 – PFZ :	$Y = 1.2993X + 2345.3213$	(B.59)
R0 – POOZ :	$Y = -2.1870X + 2160.2884$	(B.60)
R0 – SFZ :	$Y = 0.9918X + 2358.6087$	(B.61)
R0 – CAZ :	$Y = -9.6200X + 1690.2502$	(B.62)
R0 – SAR :	$Y = 4.4044X + 2508.1443$	(B.63)
R0 – AR :	$Y = -2.7340X + 2129.0581$	(B.64)
R2 :	$Y = 0.9624X + 2342.6152$	(B.65)
ou bien R2	$Y = 0,2677X^2 + 30,54X + 3148$	(B.66)
R2 – STZ :	$Y = 8.9384X + 2724.8516$	(B.67)
R2 – SAZ :	$Y = 3.5335X + 2460.2147$	(B.68)
R2 – PFZ :	$Y = -0.8497X + 2236.2321$	(B.69)
R2 – POOZ :	$Y = -0.3646X + 2260.5486$	(B.70)
R2 – SFZ :	$Y = 0.7404X + 2331.2968$	(B.71)
R2 – CAZ :	$Y = -26.5837X + 549.0702$	(B.72)
R2 – SAR :	$Y = 4.9242X + 2536.9170$	(B.73)
R2 – AR :	$Y = -1.1625X + 2214.3224$	(B.74)
R4 :	$Y = 1.9303X + 2394.0101$	(B.75)
ou bien R4	$Y = 0,2641X^2 + 31,02X + 3184$	(B.76)
R4 – STZ :	$Y = 8.8192X + 2724.8238$	(B.77)
R4 – SAZ :	$Y = 5.7014X + 2572.5018$	(B.78)
R4 – PFZ :	$Y = 0.6055X + 2308.2850$	(B.79)
R4 – POOZ :	$Y = -0.5647X + 2245.9083$	(B.80)
R4 – SFZ :	$Y = -0.7333X + 2235.1237$	(B.81)
R4 – CAZ :	$Y = -19.3743X + 1001.3018$	(B.82)
R4 – SAR :	$Y = 6.3547X + 2609.8419$	(B.83)
R4 – AR :	$Y = -0.0919X + 2273.1991$	(B.84)

B.4 Carbone Total

R0 :	$Y = -5.7384X + 1822.5251$	(B.85)
R0 – STZ :	$Y = -5.3825X + 1840.9420$	(B.86)
R0 – SAZ :	$Y = -1.3102X + 2038.6773$	(B.87)
R0 – PFZ :	$Y = -9.4202X + 1623.3706$	(B.88)
R0 – POOZ :	$Y = -4.1006X + 1919.6713$	(B.89)
R0 – SFZ :	$Y = -0.3354X + 2155.0050$	(B.90)
R0 – CAZ :	$Y = -3.3688X + 1987.1998$	(B.91)
R0 – SAR :	$Y = -4.8001X + 1867.0516$	(B.92)
R0 – AR :	$Y = -4.7053X + 1885.2433$	(B.93)
R2 :	$Y = -4.6076X + 1858.9012$	(B.94)
R2 – STZ :	$Y = -7.4913X + 1720.0339$	(B.95)
R2 – SAZ :	$Y = -4.5997X + 1858.0188$	(B.96)
R2 – PFZ :	$Y = -7.2090X + 1731.0995$	(B.97)
R2 – POOZ :	$Y = -2.1013X + 2007.3255$	(B.98)
R2 – SFZ :	$Y = 1.0530X + 2208.8976$	(B.99)
R2 – CAZ :	$Y = -21.7337X + 732.4968$	(B.100)
R2 – SAR :	$Y = -6.8216X + 1749.9794$	(B.101)
R2 – AR :	$Y = -3.1378X + 1948.0006$	(B.102)
R4 :	$Y = -3.9833X + 1891.6188$	(B.103)
R4 – STZ :	$Y = -4.1960X + 1875.5006$	(B.104)
R4 – SAZ :	$Y = -4.0861X + 1885.3438$	(B.105)
R4 – PFZ :	$Y = -7.7497X + 1697.9387$	(B.106)
R4 – POOZ :	$Y = -2.1380X + 2004.2356$	(B.107)
R4 – SFZ :	$Y = -1.2547X + 2060.5503$	(B.108)
R4 – CAZ :	$Y = -9.7585X + 1500.0975$	(B.109)
R4 – SAR :	$Y = -5.5373X + 1814.2995$	(B.110)
R4 – AR :	$Y = -1.9699X + 2014.2351$	(B.111)

B.5 Potentiel d'Hydrogène

R0 :	$Y = 0.0110X + 8.4819$	(B.112)
R0 – STZ :	$Y = 0.0194X + 8.8812$	(B.113)
R0 – SAZ :	$Y = 0.0119X + 8.5291$	(B.114)
R0 – PFZ :	$Y = 0.0195X + 8.9174$	(B.115)
R0 – POOZ :	$Y = 0.0049X + 8.1156$	(B.116)
R0 – SFZ :	$Y = -0.0304X + 5.9481$	(B.117)
R0 – CAZ :	$Y = -0.0303X + 5.9477$	(B.118)
R0 – SAR :	$Y = 0.0154X + 8.7017$	(B.119)
R0 – AR :	$Y = -0.0009X + 7.7800$	(B.120)
R2 :	$Y = 0.0103X + 8.4789$	(B.121)
R2 – STZ :	$Y = 0.0198X + 8.9409$	(B.122)
R2 – SAZ :	$Y = 0.0122X + 8.5667$	(B.123)
R2 – PFZ :	$Y = 0.0102X + 8.4438$	(B.124)
R2 – POOZ :	$Y = 0.0042X + 8.1096$	(B.125)
R2 – SFZ :	$Y = 0.0000X + 7.8428$	(B.126)
R2 – CAZ :	$Y = -0.0041X + 7.5481$	(B.127)
R2 – SAR :	$Y = 0.0177X + 8.8397$	(B.128)
R2 – AR :	$Y = 0.0053X + 8.1754$	(B.129)
R4 :	$Y = 0.0100X + 8.4599$	(B.130)
R4 – STZ :	$Y = 0.0159X + 8.7619$	(B.131)
R4 – SAZ :	$Y = 0.0158X + 8.7384$	(B.132)
R4 – PFZ :	$Y = 0.0145X + 8.6657$	(B.133)
R4 – POOZ :	$Y = 0.0040X + 8.0921$	(B.134)
R4 – SFZ :	$Y = -0.0001X + 7.8375$	(B.135)
R4 – CAZ :	$Y = -0.0077X + 7.3214$	(B.136)
R4 – SAR :	$Y = 0.0186X + 8.8824$	(B.137)
R4 – AR :	$Y = 0.0038X + 8.0807$	(B.138)

B.6 Fugacité Du CO₂ dans l'Air

R0 :	$Y = 0.6124X + 408.4701$	(B.139)
R0 – STZ :	$Y = -0.5835X + 352.8971$	(B.140)
R0 – SAZ :	$Y = 0.7601X + 416.3105$	(B.141)
R0 – PFZ :	$Y = 0.5071X + 404.3204$	(B.142)
R0 – POOZ :	$Y = 1.1484X + 439.3748$	(B.143)
R0 – SFZ :	$Y = 2.0518X + 495.3609$	(B.144)
R0 – CAZ :		(B.145)
R0 – SAR :	$Y = 0.2434X + 390.5328$	(B.146)
R0 – AR :	$Y = 1.1205X + 437.8338$	(B.147)
R2 :	$Y = 0.3658X + 392.3672$	(B.148)
R2 – STZ :	$Y = -0.1388X + 367.5259$	(B.149)
R2 – SAZ :	$Y = -0.0632X + 372.0121$	(B.150)
R2 – PFZ :	$Y = 0.7587X + 414.4418$	(B.151)
R2 – POOZ :	$Y = 0.6968X + 411.2448$	(B.152)
R2 – SFZ :	$Y = -0.1610X + 359.6996$	(B.153)
R2 – CAZ :	$Y = 2.6304X + 542.6254$	(B.154)
R2 – SAR :	$Y = -0.0354X + 372.7278$	(B.155)
R2 – AR :	$Y = 0.4075X + 394.8876$	(B.156)
R4 :	$Y = 0.5794X + 408.0624$	(B.157)
R4 – STZ :	$Y = -0.4853X + 357.8196$	(B.158)
R4 – SAZ :	$Y = -0.0439X + 378.1266$	(B.159)
R4 – PFZ :	$Y = -0.0796X + 375.2831$	(B.160)
R4 – POOZ :	$Y = 1.2782X + 448.7497$	(B.161)
R4 – SFZ :	$Y = 0.5784X + 406.6883$	(B.162)
R4 – CAZ :	$Y = 1.6596X + 478.9529$	(B.163)
R4 – SAR :	$Y = 0.0068X + 380.2694$	(B.164)
R4 – AR :	$Y = 0.8170X + 422.2426$	(B.165)

B.7 Fugacité Du CO₂ Dans l'Eau

R0 :	$Y = -1.4807X + 288.2646$	(B.166)
ou bien R0 :	$Y = -0,2713X^2 - 30,21X - 464,6$	(B.167)
R0 - STZ :	$Y = -7.7038X - 3.3001$	(B.168)
R0 - SAZ :	$Y = -3.6646X + 187.2953$	(B.169)
R0 - PFZ :	$Y = 0.8915X + 420.6407$	(B.170)
R0 - POOZ :	$Y = 0.6725X + 412.6134$	(B.171)
R0 - SFZ :	$Y = -6.2199X - 15.1926$	(B.172)
R0 - CAZ :		(B.173)
R0 - SAR :	$Y = -3.8128X + 175.3143$	(B.174)
R0 - AR :	$Y = 0.9697X + 429.1297$	(B.175)
R2 :	$Y = 3.8584X + 552.8449$	(B.176)
ou bien R2 :	$Y = -0,7143X^2 - 77,55X - 1726$	(B.177)
R2 - STZ :	$Y = -3.6367X + 165.5601$	(B.178)
R2 - SAZ :	$Y = -7.3072X - 5.3196$	(B.179)
R2 - PFZ :	$Y = 3.4263X + 554.0885$	(B.180)
R2 - POOZ :	$Y = 0.1793X + 375.8208$	(B.181)
R2 - SFZ :	$Y = -0.1412X + 341.3776$	(B.182)
R2 - CAZ :	$Y = 44.9008X + 3250.4514$	(B.183)
R2 - SAR :	$Y = -5.3662X + 88.5949$	(B.184)
R2 - AR :	$Y = 10.4987X + 974.8967$	(B.185)
R4 :	$Y = -0.5195X + 329.6516$	(B.186)
ou bien R4 :	$Y = -0,3096X^2 - 34,57X - 592,9$	(B.187)
R4 - STZ :	$Y = 2.4847X + 451.4394$	(B.188)
R4 - SAZ :	$Y = -6.5704X + 30.2158$	(B.189)
R4 - PFZ :	$Y = 0.3508X + 395.4086$	(B.190)
R4 - POOZ :	$Y = 0.6700X + 408.8186$	(B.191)
R4 - SFZ :	$Y = 4.4291X + 634.4514$	(B.192)
R4 - CAZ :	$Y = 26.7337X + 2095.1834$	(B.193)
R4 - SAR :	$Y = -4.6447X + 127.4731$	(B.194)
R4 - AR :	$Y = 2.8824X + 535.8876$	(B.195)

B.8 Vitesse Du Vent

R0 :	$Y = -0.3502X + 5.9453$	(B.196)
R0 – STZ :	$Y = -1.3395X - 40.0052$	(B.197)
R0 – SAZ :	$Y = -1.6288X - 56.9147$	(B.198)
R0 – PFZ :	$Y = 0.5307X + 53.1123$	(B.199)
R0 – POOZ :	$Y = -0.0098X + 26.2753$	(B.200)
R0 – SFZ :	$Y = -1.9743X - 97.1384$	(B.201)
R0 – CAZ :		(B.202)
R0 – SAR :	$Y = -0.6300X - 7.7841$	(B.203)
R0 – AR :	$Y = 0.2577X + 41.2854$	(B.204)
R2 :	$Y = 0.2781X + 35.6466$	(B.205)
R2 – STZ :	$Y = 1.0862X + 70.5712$	(B.206)
R2 – SAZ :	$Y = -2.5130X - 104.1198$	(B.207)
R2 – PFZ :	$Y = -1.3275X - 45.2564$	(B.208)
R2 – POOZ :	$Y = 1.7308X + 119.7963$	(B.209)
R2 – SFZ :	$Y = 0.2028X + 32.0794$	(B.210)
R2 – CAZ :	$Y = -0.7688X - 35.0686$	(B.211)
R2 – SAR :	$Y = -0.6254X - 8.9716$	(B.212)
R2 – AR :	$Y = 0.5450X + 52.4049$	(B.213)
R4 :	$Y = 0.0264X + 21.4536$	(B.214)
R4 – STZ :	$Y = 0.7826X + 52.5989$	(B.215)
R4 – SAZ :	$Y = -1.4017X - 48.7388$	(B.216)
R4 – PFZ :	$Y = 0.6938X + 60.3489$	(B.217)
R4 – POOZ :	$Y = -0.3059X + 4.7479$	(B.218)
R4 – SFZ :	$Y = 2.1218X + 151.7076$	(B.219)
R4 – CAZ :	$Y = 1.0068X + 81.1949$	(B.220)
R4 – SAR :	$Y = -0.7954X - 18.8569$	(B.221)
R4 – AR :	$Y = 0.7371X + 64.5759$	(B.222)

Annexe C

Réseaux de neurones

C.1 Récapitulatif sur les réseaux de neurones

Paradigme	Règle d'apprentissage	Architecture	Algorithme	Exemple d'utilisation
Supervisé	Correction d'erreur	Perceptron Simple ou Multi-Couches	Perceptron, Rétro-Propagation, Adaline, Madaline.	Classification, Approximation de fonctions, Prédiction, Contrôle.
	Bolzmman	Récurrente	Apprentissage de Boltzmann	Classification
	Hebb	Multi-Couches non bouclés	Analyse de discriminants linéaires	Analyse de données, Classification.
	Par compétition		à compétition	LVQ
ART			ARTMap	Classification, Catégorisation au sein d'une classe.

TABLEAU C.1 – Récapitulatif sur l'apprentissage *Supervisé* avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.

Paradigme	Règle d'apprentissage	Architecture	Algorithme	Exemple d'utilisation
Non Supervisé	Correction d'erreur	Multi-couches non bouclé	Projection Sammon	de Analyse de données
	Hebb	Non bouclé ou à compétition	Analyse composantes principales	en Analyse de données, compression de données.
	Par compétition	à compétition	VQ	Catégorisation, Compression de données.
		Cartes de Kohonen	SOM	Catégorisation, Analyse de données, Classification.
		ART	ART-1, ART-2	Catégorisation.

TABLEAU C.2 – Récapitulatif sur l'apprentissage *Non-Supervisé* avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.

Paradigme	Règle d'apprentissage	Architecture	Algorithme	Exemple d'utilisation
Hybride	Correction d'erreur et par compétition	RBF	RBF	Classification, Approximation de fonctions, Prédiction, Contrôle.

TABLEAU C.3 – Récapitulatif sur l'apprentissage *Hybride* avec les règles, les architectures, les algorithmes et les exemples appropriés.

C.2 Paramètres d'apprentissage

L'apprentissage des FNNs réalisés dans la thèse ont tous étaient faits suivant l'algorithme LMA (Levenberg-Marquardt Algorithm), ce dernier est par défaut paramétré de la façon suivante dans MatLab[®] :

Les valeurs initiales pour le lancement de l'apprentissage :

- Nombre maximum d'itérations : 1000.
- Objectif d'erreur : 0.
- Nombre d'échecs de validation maximum : 6.
- Le taux d'apprentissage initial μ : 0,001.
- Le facteur de diminution de μ : 0,1.
- Le facteur d'augmentation de μ : 10.
- La valeur maximum de μ (μ_{max}) : 10^{10} .
- Temps d'apprentissage maximum : Infini.

- Le Gradient de performance minimum $\nabla : 10^{-7}$
- L'apprentissage s'arrête quand l'une de ces conditions est vérifiée :
- Le nombre maximum d'itérations est dépassé.
- Le temps maximum d'apprentissage est dépassé.
- L'objectif d'erreur est atteint.
- Le gradient ∇ devient inférieur au gradient minimum.
- Le taux d'apprentissage μ dépasse μ_{max} .
- Le nombre d'échecs de validation est dépassé.

C.3 Différents nombres de neurones dans la couche cachée

Dans cette annexe, on montre la différence du modèle généré lors de l'utilisation d'un FNN avec différents nombres de neurones dans la couche cachée. On remarque que plus on augmente le nombre de neurones, plus le problème est considéré comme complexe et donc un modèle plus complexe. La figure C.1 montre la différence entre trois FNNs de 5, 10 et 20 neurones dans la couche cachée respectivement. On remarque clairement que l'augmentation du nombre induit directement sur le modèle généré (ici représenté par une surface) et le rend plus complexe et donc moins stable en vue des régions à interpoler.

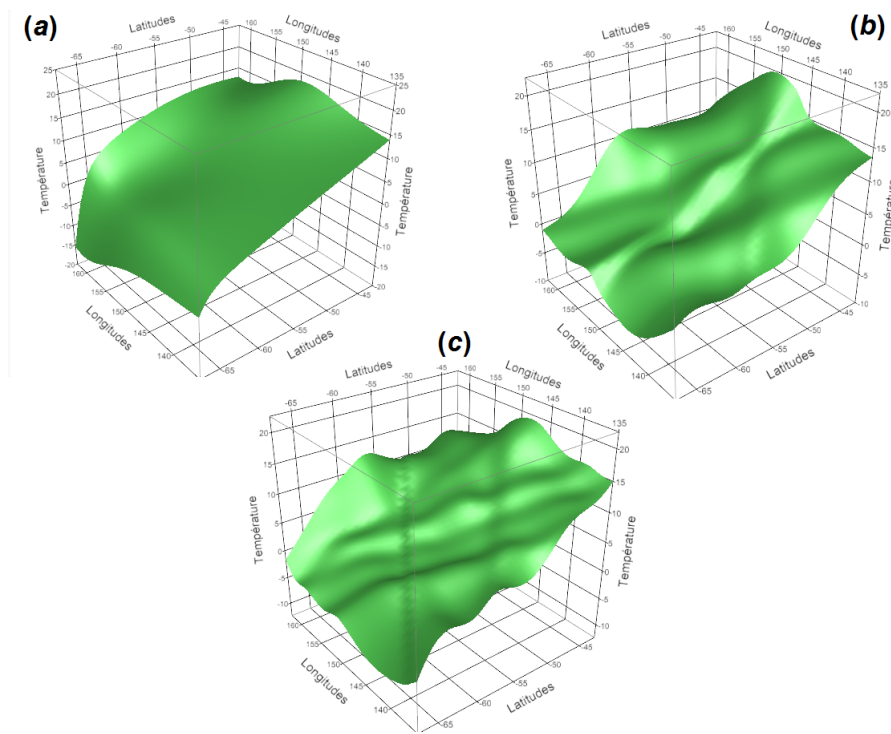


FIGURE C.1 – Exemple de modélisation avec un FNN en utilisant différents nombres de neurones dans la couche cachée, pour l'interpolation d'une image *sat* de température, (a) : FNN avec 5 neurones dans la couche cachée, (b) : FNN avec 10 neurones dans la couche cachée, (c) : FNN avec 20 neurones dans la couche cachée.

Annexe D

Algorithmes et Codes

D.1 Complexité d'un algorithme

La complexité des algorithmes est la définition de la taille du problème, c'est-à-dire de la quantité de données qui doit être traitée. En pratique, la taille d'un problème est mesurée par la longueur du plus petit codage nécessaire à la représentation des données du problème, celui-ci est étroitement liée à la vitesse d'exécution de façon réciproque.

Soit n le nombre d'opérations élémentaires à exécuter, le tableau D.1 donne les différentes complexités que peut avoir un algorithme.

Complexité	n (Taille du problème)			
	2	8	128	1024
$\log_2 n$	1	3	7	10
n	2	2^3	2^7	2^{10}
$n \log_2 n$	2	3×2^3	7×2^7	10×2^{10}
n^2	2^2	2^6	2^{14}	2^{20}
n^3	2^3	2^9	2^{21}	2^{30}
2^n	2^2	2^8	2^{128}	2^{1024}
$n!$	2	5×2^{13}	5×2^{714}	7×2^{8766}

TABLEAU D.1 – Liste des fonctions d'activation les plus utilisées

D.2 Interpolation d'une image *sat* par RLM

Ce code présente comment nous avons procédé pour interpoler une image *sat* de température produite par le satellite MODIS_{Aqua} en utilisant la régression linéaire multiple. Soit un tableau nommé "Data" représentant un tableau de trois colonnes (Latitude, Longitude et température) :

```

%On crée un modèle pour l'image en cours, le modèle correspond
% à une équation du 5ème degré
ModelTemp=fit([Data(:,1),Data(:,2)],Data(:,3),'poly55');
%On recrée notre image en utilisant les Latitude et Longitude de notre région
ImageSatReconstruite = [LatLon(:,1),LatLon(:,2), ...
ModelTemp([LatLon(:,1),LatLon(:,2)])];
%On élimine les outliers (l'intervalle pour accepter une sortie du modèle est
%le minimum et le maximum des valeurs en entrée)
ImageSatReconstruite = ...
ImageSatReconstruite(ImageSatReconstruite(:,3)<=max(Data(:,3)) & ...
ImageSatReconstruite(:,3)>=min(Data(:,3)),:);
%Sauvegarde de l'image reconstruite
eval(['save ModeledSatelliteTemp\TempSat_',jour,'_',num2str(t_annee(i,:)), ...
' ImageSatReconstruite']);

```

CODE SOURCE D.1 – Interpolation d'une image *sat* de SST_{MODIS_a} par RLM.

D.3 Création des numéros de jours pour chaque image sous 8 jours

Le code présenté dans cette annexe a été utilisé pour créer les tableaux de référencement aux numéros des jours correspondant aux 8 jours des images *sat* de MODIS_{Aqua} ; ceci pour faciliter l'utilisation des données *sat*.

```

%Pour toutes les années allant de 2002 à 2015, on cré un tableau
for annee = 2002:2015;
    eval(['RefNumJour',num2str(annee),'=[];']);
    eval(['RefNumJourForID',num2str(annee),'=[];']);
for i=1:8:361
    k=i+7;
    %366 jours pour les années bissextiles et 365 jours pour les autres
    if k==368 & (annee==2004 | annee==2008 | annee==2012) k=366;
    elseif k==368 & (annee==2002 | annee==2003 | annee==2005 ...
        | annee==2006 | annee==2007 | annee==2009 ...
        | annee==2010 | annee==2011 | annee==2013 ...
        | annee==2014 | annee==2015) k=365;

    end
    eval(['RefNumJourForID',num2str(annee),'=',...
        '[RefNumJourForID',num2str(annee),';i,k];',]);
    %Jour de début et jour de fin chaque 8 jours
    deb = num2str(i); fin = num2str(k);
    if (length(deb)==2) deb=['0',deb];elseif (length(deb)==1) deb=['00',deb]; end
    if (length(fin)==2) fin=['0',fin];elseif (length(fin)==1) fin=['00',fin];end
    eval(['RefNumJour',num2str(annee),'=', '[RefNumJour',num2str(annee),';deb,fin];',]);
end
end

```

CODE SOURCE D.2 – Création des numéros de jours dans l'année pour chaque tranche de 8 jours.

D.4 Téléchargement automatique des données *sat*

Les codes présentés dans cette annexe permettent de télécharger automatiquement les données *sat* suivant le satellite en question. Nous commençons par présenter un exemple de téléchargement des données *sat* de MODIS_{Aqua} d'un jour :

```
%On télécharge les données sat dont on a besoin (par rapport aux données in situ)
%Le tableau NumJourAnnee contient les Années et les numéros des jours in situ
for i=1:size(NumJourAnnee)
    fullURL = ['http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/cgi/getfile/A', ...
        num2str(NumJourAnnee(i,1)),num2str(NumJourAnnee(i,2)),'.L3m_DAY_SST_sst_4km.nc'];
    filename = ['D:\sstDay\NC',num2str(NumJourAnnee(i,2)),'\A', ...
        num2str(NumJourAnnee(i,2)),'_',num2str(NumJourAnnee(i,1)),'.L3m_DAY_SST_sst_4km.nc'];
    urlwrite(fullURL,filename);
end
```

CODE SOURCE D.3 – Exemple de téléchargement des données *sat* d'un jour de MODIS_{Aqua}.

La sortie de ce code donne la SST sous 1 jour, par exemple, pour l'image représentant le 13/10/2002, nous avons en sortie un fichier comme ceci :

```
D : \sstDay\NC2002\A2002_287.L3m_DAY_SST_sst_4km.nc
```

Passons maintenant aux données *sat* de MODIS_{Aqua} sous 8 jours. Nous lançons tout d'abord le code vu dans l'annexe précédente (Code Source D.2) pour avoir le jour de début et le jour de fin pour chaque huitaine, et ensuite :

```
%On télécharge les données \SAT entre 2002 et 2014 d'octobre à décembre
for an =2002:2014;
    for id=37:46 %37: Première huitaine d'octobre, 46: dernière huitaine de décembre
        eval(['ref=RefNumJour',num2str(an),';']);
        fullURL = ['http://oceandata.sci.gsfc.nasa.gov/cgi/getfile/A', ...
            num2str(an),ref(id,1:3),num2str(an),ref(id,4:6),'.L3m_8D_SST_sst_4km.nc'];
        filename = ['D:\sstWeek\NC',num2str(an),'\A',num2str(an),'_', ...
            ref(id,1:3),'_',ref(id,4:6),'.L3m_8_DAY_SST_sst_4km.nc'];
        urlwrite(fullURL,filename);
    end
end
```

CODE SOURCE D.4 – Exemple de téléchargement des données *sat* de 8 jours de MODIS_{Aqua}.

La sortie de ce code donne la SST (composite sous 8 jours), par exemple, pour l'image représentant les jours entre 10/12/2002 et le 17/12/2002, nous avons en sortie un fichier comme ceci :

```
D : \sstWeek\NC2002\A2002_345_352.L3m_8_DAY_SST_sst_4km.nc
```

Présentons maintenant le code qui permet de télécharger les données *sat* de la vitesse du vent d'ASCAT. Contrairement à MODIS_{Aqua}, ces données sont disponibles sur un serveur FTP de l'IFREMER (ftp.ifremer.fr) :

```

nw = ftp('ftp.ifremer.fr'); %lien vers le serveur ftp
for an = 2014:2015 % Exemple : Vitesse du vent de 2014 et 2015
Chem = '/ifremer/cersat/products/gridded/MWF/L3/ASCAT/Daily/Netcdf/'; %Chemin
ms = dir(nw, [Chem,num2str(an)]);
for i=1:3 % Exemple: mois de Janvier à Mars
    js = dir(nw, [Chem,num2str(an),'/',ms(i).name]);
    for j=1:size(js,1) % tout les jours du mois concerné
        dirdata=dir(nw, [Chem,num2str(an),'/',ms(i).name,'/',js(j).name]);
        if (~isempty(dirdata))
            mget(nw, [Chem,num2str(an),'/',ms(i).name,'/',js(j).name,'/',dirdata.name]);
            movefile([Chem,num2str(an),'/',ms(i).name,'/',js(j).name,'/',dirdata.name],...
                [num2str(an),'/',num2str(an),'_',ms(i).name,'_',js(j).name,'.nc.bz2']);
        end
    end
end
end

```

CODE SOURCE D.5 – Exemple de téléchargement des données *sat* d'ASCAT.

La sortie de ce code donne la VV d'un jour, par exemple, pour l'image représentant le 23/10/2010, nous avons en sortie un fichier comme ceci :

```
D : \WindSpeed_ASCAT_DAILY\2010\10\23\20101023.nc
```

Le téléchargement des données *sat* de QSCAT se fait de la même façon en changeant le chemin c'est à dire remplacer :

```
/ifremer/cersat/products/gridded/MWF/L3/ASCAT/Daily/Netcdf/
```

Par :

```
/ifremer/cersat/products/gridded/MWF/L3/QuikSCAT/Daily/Netcdf/
```

Pour l'échelle de temps, pour les deux cas vu précédemment, il faudra remplacer ../Daily/... par remplacer ../Monthly/... pour avoir les images sous un mois.

Les données de SMOS on été téléchargées de façon manuelle sur <http://cp34-bec.cmima.csic.es/thredds/BECOcean.html> en ayant déjà créé un compte sur <http://cp34-bec.cmima.csic.es/>. Un travail est fait depuis ces dernières années pour avoir un accès en ftp au données via le Centre Aval de Traitement des Données SMOS (CATDS).

Les données d'AQUARIUS peuvent être téléchargées de la même façon que celles présentées dans les deux codes source D.3 et D.4. Changer l'échelle de temps reviendrait à changer les chemins et les noms de fichiers à télécharger, on peut trouver tout cela sur le site dédié à l'accès direct au données de MODIS_{Aqua} : <http://oceansci.gsfc.nasa.gov/MODIS-Aqua/Mapped>.

D.5 Calcul du Flux

Dans cette annexe, on présente le code mis en place pour calculer le flux de façon à prendre toutes les données *sat*, les combiner dans un tableau puis procéder aux calculs. La fonction FCO2 utilisée dans ce code est celle présentée dans le chapitre 5 ; code source 5.1.

```

load Model % model de salinité (MLR)
load Net17 net % model de la fugacité du CO2 (FNN)
%Exemple du calcul du flux correspondant à la rotation R0
for an = 2002:2014
    eval(['ref=RefNumJour', num2str(an), ';' ]);
    for i=37:44
        eval(['refDb=RefNumJourForID', num2str(an), ';' ]);
        disp([num2str(an), '_', num2str(i)]);
        Flux = [];
        %chargement de la température
        eval(['load TempReconstructed\TempSat_', num2str(an), '_', ref(i,1:3), '_', ref(i,4:6)]);
        Flux = ImageSatReconstruite;
        %calcul de la salinité
        Flux(:,4) = Model(Flux(:,1),Flux(:,3));
        %chargement de la chlorophylle
        eval(['load ChlorReconstructed\ChlorSat_', num2str(an), '_', ref(i,1:3), '_', ref(i,4:6)]);
        Flux(:,5) = ImageSatReconstruite(:,3);
        %calcul de la fugacité du CO2
        Flux(:,6) = net([Flux(:,3),Flux(:,5)]');
        %chargement de la vitesse du vent
        eval(['load WindSpeedReconstructed\WSSat_', num2str(an), '_', ref(i,1:3), ...
            '_', ref(i,4:6)]);
        Flux(:,7)=0;
        for k=1:size(Flux,1)
            dist = sqrt((Flux(k,1)-ImageSatReconstruite(:,1)).^2 + ...
                ( Flux(k,2)-ImageSatReconstruite(:,2)).^2 );
            [minval,ind] = min(dist);
            if minval<=0.25 Flux(k,7)=ImageSatReconstruite(ind,3); else Flux(k,7) = 0; end
        end
        %chargement de la fugacité du CO2 dans l'air (Cape Grim)
        load CapGrimData
        m = [datestr(datenum(['01/01/', num2str(an)], 'dd/mm/yyyy')+refDb(i,1)-1, 'mm')];
        MoisEnCour=str2num(m); id = find(CG_annee == an & CG_mois == MoisEnCour);
        if (~isempty(id)) Flux(:,8)=CG_fCO2_A_InSitu(id); else Flux(:,8)=0; end
        %Elimination des points où une des données pour le calcul du flux est indisponible :
        id = Flux(:,3)~=0 & Flux(:,5)~=0 & Flux(:,7)>0 ; Flux = Flux(id,:);

```

```
%Calcul du flux et sauvegarde des resultat suivant Chaque référence
for RefFlux = 1:11
    [K,F_CO2, dpCO2]=FCO2(Flux(:,6),Flux(:,8),Flux(:,3),Flux(:,4),Flux(:,7),RefFlux);
    Flux(:,9) = F_CO2;
    eval(['save FluxMap\Ref',num2str(RefFlux),'_',num2str(an),'_',ref(i,1:3),...
        '_ ',ref(i,4:6),' Flux']);
end
end
end
```

CODE SOURCE D.6 – Calcul du flux en utilisant les données *sat*.

D.6 Équation à partir d'un FNN

Le code suivant a été spécialement écrit pour les personnes souhaitant utiliser les FNNs construits dans nos expériences mais ne disposant pas de MatlabTM. Il permet donc de donner sous forme d'une chaîne de caractères les équations et les coefficients. A noter que ce code ne fonctionne qu'avec un FNN avec une seule couche cachée. Ce code est publié sous forme d'une fonction dans ZENODO (<https://zenodo.org/badge/latestdoi/22278/mabenallal/FnnToEquation>) via GITHUB (<https://github.com/mabenallal/FnnToEquation/releases/tag/V1.0>) sous le DOI : 10.5281/zenodo.53060.

```
load Net39 net % Exemple FNN pour R2 (39 neurones dans la couche cachée)
% Poids, biais et paramètres de transfert entre les 3 couches :
IW = net.IW{1,1} ;
b1 = net.b{1};
b2 = net.b{2};
LW = net.LW{2,1};
InputsParam=net.inputs{1};
PS_Input=InputsParam.processSettings{1,1};
Range_Input=net.inputs{1}.range;
% | h | g |
% | l | k |
% e = 1, f = -1;
OutputParam = net.outputs{2};
% | o (x_min) | n (x_max) |
% m = -1 (y_min), p=1 (y_max)
PS_Output = OutputParam.processSettings{1,1};
Range_Output=net.outputs{2}.range;
v = num2str(b2);
% Construction de l'équation :
resu = ['y = (v) ; ai=''; bi=''; ci=''; di=''];

for i=1:size(IW,1)
    resu = [resu, ' + a', num2str(i), ' * tansig(b', num2str(i), ' * ( (e-f)*(SST-h)/(g-h) + f) ...
            + c', num2str(i), ' * ( (e-f)*(CHLa-l)/(k-l) + f) + d', num2str(i), ', ')];
    ai = [ai, 'a', num2str(i), '=', num2str(LW(i)), ', '];
    bi = [bi, 'b', num2str(i), '=', num2str(IW(i,1)), ', '];
    ci = [ci, 'c', num2str(i), '=', num2str(IW(i,2)), ', '];
    di = [di, 'd', num2str(i), '=', num2str(b1(i)), ', '];
end
resu = [resu, ' - m)*(n-o)/(p-m) + o'];
```

CODE SOURCE D.7 – Création d'une équation à partir d'un FNN.

Annexe E

Modélisation de la salinité

E.1 Équations de salinité produites pour chaque rotation

Nous présentons, dans cette section d'annexe, les équations obtenues pour l'application d'une RLM en utilisant le CFTool de MATLABTM

$$\begin{aligned} \text{SSS} = & 33,4098606219252 - 0,0074260348442 \times \text{lat} + 0,1314127410541 \times \text{SST} \\ & + 0,0024259651101 \times \text{lat} \times \text{SST} + 0,0069729717250 \times \text{SST}^2 \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

$$\begin{aligned} \text{SSS} = & 32,1589924635953 - 0,0270275393449499 \times \text{lat} + 0,287539627552628 \times \text{SST} \\ & + 0,00502257805178110 \times \text{lat} \times \text{SST} + 0,00372394528463774 \times \text{SST}^2 \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

$$\begin{aligned} \text{SSS} = & 30,9824676891882 - 0,0440016820993262 \times \text{lat} + 0,340905000435566 \times \text{SST} \\ & + 0,00499277104324562 \times \text{lat} \times \text{SST} + 0,00135950547219107 \times \text{SST}^2 \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

E.2 Résultats détaillés pour l'estimation de la salinité

Dans cette annexe, sont présentés tout les résultats en détails pour l'expérience présentée en section 3.2 chapitre 3. Les titres suivants présentent, pour chaque type d'images utilisées, et pour chaque rotation R0, R2 et R4, deux tableaux présentant les résultats comme suit :

- Le premier tableau contient les résultats en utilisant les données de la partie "création du modèle" (entre 2002/2003 et 2007/2008). On a une première partie du tableau dite *données in situ* où l'on montre les résultats de la modélisation, et une deuxième partie dite *données sat* où on applique le modèle sur les points *sat* correspondants à ces mêmes points *in situ*.
- Le deuxième tableau contient les résultats en utilisant les données de la partie "test du modèle" (entre 2008/2009 et 2014/2015). On a une première partie du tableau dite *données in situ* où l'on montre les résultats de l'estimation de la salinité avec les données *in situ* de validation non-utilisées pour créer le modèle, et une deuxième partie dite *données sat* où l'on applique le modèle sur les points *sat* correspondants à ces mêmes points *in situ*; c'est le RMSE de ce dernier test que l'on prend comme étant la valeur qui détermine la précision du modèle.

Pour être plus précis :

- MBE_S , MAE_S et $RMSE_S$ sont les erreurs de salinité ; dans la partie *in situ*, ce sont les erreurs de modélisation. Dans la partie *sat* ce sont les erreurs de résultantes de l'application du modèle sur les données *sat*.
- MBE_T , MAE_T et $RMSE_T$ représentent les erreurs de température entre le type d'image utilisée et les données *in situ* (permet de savoir si l'image de température utilisée pour estimer la salinité contient peu ou beaucoup d'erreurs).

E.2.1 Généralisation de la solution, Image *sat* d'une journée

E.2.1.1 R0

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE_S	MAE_S	$RMSE_S$	Nb	MBE_T	MAE_T	$RMSE_T$	MBE_S	MAE_S	$RMSE_S$
STZ	15719	-0.0213	0.1119	0.1443	2392	-0.2925	0.3869	0.5580	-0.1160	0.1427	0.1728
SAZ	15911	-0.0162	0.0946	0.1087	2367	-0.3518	0.3783	0.4713	-0.0695	0.0984	0.1171
PFZ	11492	0.0516	0.0684	0.0878	391	-0.7980	0.7988	1.1414	-0.0031	0.0663	0.0828
POOZ	22943	-0.0093	0.0395	0.0471	634	-0.4792	0.4792	0.5185	0.0123	0.0325	0.0404
SFZ	8785	-0.0033	0.0656	0.0939	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
CAZ	0	NaN	NaN	NaN	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	75703	0.0000	0.0763	0.1046	5797	-0.3707	0.4209	0.5802	-0.0743	0.1079	0.1378

TABLEAU E.1 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE_S	MAE_S	$RMSE_S$	Nb	MBE_T	MAE_T	$RMSE_T$	MBE_S	MAE_S	$RMSE_S$
STZ	19760	-0.0293	0.0993	0.1318	1871	-0.0291	0.3028	0.4365	-0.0467	0.0996	0.1311
SAZ	19356	-0.0669	0.1150	0.1287	3006	-0.2479	0.5869	1.0715	-0.0359	0.1545	0.2217
PFZ	13969	0.0144	0.0857	0.1032	490	-0.2196	0.2407	0.2881	-0.0069	0.0460	0.0658
POOZ	30114	-0.0439	0.0597	0.0933	618	-0.3767	0.3786	0.4748	-0.0278	0.0527	0.0779
SFZ	10131	-0.0510	0.1127	0.1349	110	-0.1674	0.2393	0.2638	-0.2419	0.2419	0.2429
CAZ	821	-0.1842	0.1842	0.1965	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	94993	-0.0365	0.0913	0.1194	6095	-0.1900	0.4445	0.8097	-0.0398	0.1202	0.1776

TABLEAU E.2 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.1.2 R2

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	14178	-0.0295	0.1552	0.1959	3275	-0.2508	0.4331	0.6161	-0.0284	0.1508	0.1802
SAZ	15007	-0.0215	0.0719	0.0968	2961	-0.3100	0.3323	0.3652	-0.0573	0.0822	0.0988
PFZ	11663	0.0575	0.0688	0.0865	1436	-0.3856	0.3891	0.4629	0.0190	0.0336	0.0426
POOZ	22831	-0.0231	0.0473	0.0590	1672	-0.5485	0.6195	1.1517	-0.0803	0.0952	0.1094
SFZ	16904	0.0475	0.0916	0.1403	733	-0.0681	0.5998	0.8415	0.0738	0.0810	0.1026
CAZ	5762	-0.0913	0.1943	0.2304	209	0.7530	1.0991	1.4092	0.0667	0.0694	0.0855
Glob.	86949	-0.0000	0.0938	0.1402	10286	-0.3016	0.4536	0.7040	-0.0293	0.0990	0.1275

TABLEAU E.3 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	16743	-0.0671	0.1613	0.1949	4170	-0.0933	0.5083	0.7207	-0.0685	0.2114	0.2576
SAZ	16527	-0.0802	0.1271	0.1583	2723	-0.3078	0.4065	0.7837	-0.0905	0.1133	0.1404
PFZ	11041	0.0128	0.0656	0.0888	756	-0.3595	0.3687	0.4854	-0.0405	0.0862	0.1038
POOZ	22889	-0.0348	0.0463	0.0578	1687	-0.3477	0.3637	0.6841	-0.0328	0.0434	0.0577
SFZ	17408	0.1142	0.1508	0.2222	767	-0.1349	0.1964	0.3526	0.0374	0.0448	0.0612
CAZ	8847	0.2679	0.3244	0.3735	8	-1.9972	1.9972	1.9972	0.2110	0.2110	0.2110
Glob.	94532	0.0166	0.1312	0.1910	10123	-0.2171	0.4240	0.6984	-0.0576	0.1353	0.1858

TABLEAU E.4 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.1.3 R4

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	11655	-0.0521	0.1706	0.2113	983	-0.2440	0.4855	0.6786	-0.0498	0.1498	0.2017
SAZ	11929	-0.0023	0.0881	0.1067	881	-0.4079	0.4815	0.6215	0.0128	0.0889	0.1086
PFZ	9404	0.0658	0.0963	0.1160	937	-0.4827	0.4856	0.5560	0.0621	0.0944	0.1137
POOZ	18750	-0.0134	0.0549	0.0742	1939	-0.6207	0.6209	0.7636	-0.0511	0.0554	0.1084
SFZ	13629	-0.0121	0.0454	0.0561	578	-0.4323	0.4354	0.5215	-0.0589	0.0610	0.0674
CAZ	5474	0.0218	0.1306	0.1698	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	71713	0.0000	0.0924	0.1332	5318	-0.4710	0.5288	0.6676	-0.0212	0.0859	0.1286

TABLEAU E.5 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	17920	-0.0663	0.1418	0.1836	2570	0.2056	0.5004	0.7374	0.0935	0.2155	0.2812
SAZ	17890	-0.0503	0.1063	0.1372	892	-0.2300	0.3978	0.5399	-0.0937	0.1456	0.1851
PFZ	13268	0.0383	0.0834	0.0988	1791	-0.2745	0.3482	0.4947	0.0286	0.0791	0.0999
POOZ	25824	-0.0315	0.0624	0.0790	961	-0.5889	0.6052	0.9619	-0.0893	0.0917	0.1132
SFZ	20157	0.0365	0.0752	0.1192	630	-0.2860	0.3131	0.3828	0.0220	0.0603	0.0913
CAZ	5275	0.2778	0.3481	0.4620	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	101773	0.0004	0.1057	0.1632	6867	-0.1315	0.4459	0.6714	0.0209	0.1397	0.1991

TABLEAU E.6 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.2 Généralisation de la solution, Image *sat* d'une journée interpolées avec la RLM

E.2.2.1 R0

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	15719	-0.0213	0.1119	0.1443	14989	-0.3649	0.9807	1.2229	-0.0968	0.2409	0.2953
SAZ	15911	-0.0162	0.0946	0.1087	15911	-0.5692	1.0286	1.3016	-0.0751	0.1878	0.2236
PFZ	11492	0.0516	0.0684	0.0878	11227	-0.1466	1.3620	1.6611	0.0473	0.1077	0.1305
POOZ	22943	-0.0093	0.0395	0.0471	15188	0.2611	1.5904	2.4483	0.0407	0.0604	0.1486
SFZ	8785	-0.0033	0.0656	0.0939	3383	4.8563	5.1710	6.4724	0.1619	0.1774	0.2868
CAZ	0	NaN	NaN	NaN	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	75703	0.0000	0.0763	0.1046	60755	0.0691	1.4493	2.2705	-0.0155	0.1537	0.2189

TABLEAU E.7 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée interpolées par RLM ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	19760	-0.0293	0.0993	0.1318	19759	-0.4691	0.9678	1.3827	-0.1142	0.2076	0.2851
SAZ	19356	-0.0669	0.1150	0.1287	19356	-0.6089	1.0795	1.5730	-0.1342	0.1970	0.2547
PFZ	13969	0.0144	0.0857	0.1032	13313	-0.3205	1.2708	1.7813	-0.0058	0.1272	0.1676
POOZ	30114	-0.0439	0.0597	0.0933	22406	-0.0287	1.1858	1.6350	-0.0445	0.0693	0.1039
SFZ	10131	-0.0510	0.1127	0.1349	3674	4.3904	4.7378	6.9950	0.1343	0.2859	0.4061
CAZ	821	-0.1842	0.1842	0.1965	341	10.4660	10.4660	10.4674	-0.0187	0.0781	0.1059
Glob.	94993	-0.0365	0.0913	0.1194	78921	-0.0793	1.3242	2.2652	-0.0688	0.1553	0.2277

TABLEAU E.8 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.2.2 R2

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	14178	-0.0295	0.1552	0.1959	14178	-1.3893	1.7304	2.8522	-0.2368	0.3688	0.5189
SAZ	15007	-0.0215	0.0719	0.0968	15007	-0.5992	1.0305	1.5643	-0.0813	0.1408	0.2028
PFZ	11663	0.0575	0.0688	0.0865	11663	-0.3492	0.8421	1.1415	0.0318	0.0812	0.0996
POOZ	22831	-0.0231	0.0473	0.0590	21771	-0.9062	1.0164	1.3054	-0.0387	0.0508	0.0618
SFZ	16904	0.0475	0.0916	0.1403	12200	-0.0674	0.8133	1.2027	0.0627	0.0797	0.1113
CAZ	5762	-0.0913	0.1943	0.2304	1926	0.2161	0.6815	1.0908	0.0627	0.1347	0.1649
Glob.	86949	-0.0000	0.0938	0.1402	76797	-0.6889	1.0838	1.7093	-0.0540	0.1386	0.2512

TABLEAU E.9 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	16743	-0.0671	0.1613	0.1949	16159	-0.1127	1.1102	1.4522	-0.0885	0.3167	0.3809
SAZ	16527	-0.0802	0.1271	0.1583	16527	-0.5103	1.0148	1.3568	-0.1290	0.2114	0.2697
PFZ	11041	0.0128	0.0656	0.0888	11041	0.2442	1.0648	1.3159	0.0295	0.1070	0.1299
POOZ	22889	-0.0348	0.0463	0.0578	22889	-0.5787	1.2501	1.5771	-0.0351	0.0554	0.0679
SFZ	17408	0.1142	0.1508	0.2222	16060	0.1518	1.3557	1.9302	0.1146	0.1457	0.2197
CAZ	8847	0.2679	0.3244	0.3735	2269	0.3365	1.2065	1.5768	0.1171	0.2653	0.3243
Glob.	94532	0.0166	0.1312	0.1910	85016	-0.2068	1.1721	1.5569	-0.0225	0.1650	0.2392

TABLEAU E.10 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.2.3 R4

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	11655	-0.0521	0.1706	0.2113	11633	-0.6913	1.5368	2.3988	-0.1503	0.3648	0.4853
SAZ	11929	-0.0023	0.0881	0.1067	11929	-0.7451	1.6688	2.9176	-0.0809	0.2496	0.3925
PFZ	9404	0.0658	0.0963	0.1160	9404	-0.5234	0.8627	1.3104	0.0171	0.1206	0.1553
POOZ	18750	-0.0134	0.0549	0.0742	18750	-0.6540	0.7829	1.0166	-0.0527	0.0653	0.0976
SFZ	13629	-0.0121	0.0454	0.0561	11883	0.1431	1.5470	2.8272	-0.0006	0.0798	0.1213
CAZ	5474	0.0218	0.1306	0.1698	1264	1.5925	1.6015	2.2631	0.1578	0.1760	0.2474
Glob.	71713	0.0000	0.0924	0.1332	64925	-0.4687	1.2478	2.1692	-0.0514	0.1659	0.2841

TABLEAU E.11 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	17920	-0.0663	0.1418	0.1836	17338	-0.3466	1.1750	1.4280	-0.1246	0.2913	0.3517
SAZ	17890	-0.0503	0.1063	0.1372	17890	-0.5943	1.0031	1.2590	-0.1196	0.1797	0.2270
PFZ	13268	0.0383	0.0834	0.0988	13268	-0.2729	0.9736	1.2807	0.0100	0.1041	0.1332
POOZ	25824	-0.0315	0.0624	0.0790	23903	0.0374	1.0159	1.6318	-0.0319	0.0917	0.1193
SFZ	20157	0.0365	0.0752	0.1192	14398	-0.1383	1.2267	2.2071	0.0466	0.1024	0.1738
CAZ	5275	0.2778	0.3481	0.4620	3662	2.3866	2.4977	3.6868	0.3894	0.4304	0.5629
Glob.	101773	0.0004	0.1057	0.1632	90535	-0.1395	1.1309	1.7241	-0.0312	0.1646	0.2406

TABLEAU E.12 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée interpolées par RLM ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.3 Généralisation de la solution, Image *sat* d'une journée interpolée avec les NNs

E.2.3.1 R0

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	15719	-0.0213	0.1119	0.1443	15450	-0.4954	1.1097	1.4060	-0.1144	0.2627	0.3166
SAZ	15911	-0.0162	0.0946	0.1087	15911	-0.4205	0.9475	1.2099	-0.0612	0.1792	0.2156
PFZ	11492	0.0516	0.0684	0.0878	10756	-0.0107	1.4505	1.8776	0.0616	0.1168	0.1446
POOZ	22943	-0.0093	0.0395	0.0471	18448	0.2916	1.3683	1.7617	0.0212	0.0430	0.0567
SFZ	8785	-0.0033	0.0656	0.0939	5446	1.3571	1.4824	2.1548	-0.0100	0.0735	0.1019
CAZ	0	NaN	NaN	NaN	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	75703	0.0000	0.0763	0.1046	66078	-0.0267	1.2291	1.6251	-0.0263	0.1419	0.1997

TABLEAU E.13 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	19760	-0.0293	0.0993	0.1318	19696	-0.6843	1.0290	1.4453	-0.1543	0.2236	0.2998
SAZ	19356	-0.0669	0.1150	0.1287	19356	-0.6927	1.0203	1.2675	-0.1549	0.2014	0.2380
PFZ	13969	0.0144	0.0857	0.1032	13969	-0.3766	1.5328	2.1281	0.0083	0.1157	0.1459
POOZ	30114	-0.0439	0.0597	0.0933	26440	-0.2391	1.0198	1.3735	-0.0421	0.0664	0.1026
SFZ	10131	-0.0510	0.1127	0.1349	5750	0.5976	0.8972	1.1237	-0.0668	0.1379	0.1577
CAZ	821	-0.1842	0.1842	0.1965	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	94993	-0.0365	0.0913	0.1194	85290	-0.4112	1.0976	1.5032	-0.0869	0.1464	0.2052

TABLEAU E.14 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.3.2 R2

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	14178	-0.0295	0.1552	0.1959	14170	-0.5271	1.0651	1.4589	-0.1199	0.2708	0.3425
SAZ	15007	-0.0215	0.0719	0.0968	15007	-0.1687	0.9353	1.2102	-0.0355	0.1212	0.1530
PFZ	11663	0.0575	0.0688	0.0865	11663	-0.2022	0.7980	1.0301	0.0412	0.0780	0.0951
POOZ	22831	-0.0231	0.0473	0.0590	21482	-0.5395	0.8202	1.1267	-0.0299	0.0541	0.0660
SFZ	16904	0.0475	0.0916	0.1403	12749	-0.5053	0.9067	1.1599	0.0652	0.0927	0.1220
CAZ	5762	-0.0913	0.1943	0.2304	2280	-0.1439	0.5512	0.7509	0.0209	0.1310	0.1589
Glob.	86949	-0.0000	0.0938	0.1402	77398	-0.3972	0.8904	1.1938	-0.0194	0.1192	0.1785

TABLEAU E.15 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	16743	-0.0671	0.1613	0.1949	16743	-0.6446	1.6369	2.3269	-0.1665	0.3933	0.4934
SAZ	16527	-0.0802	0.1271	0.1583	16527	-0.4721	1.0565	1.4229	-0.1222	0.2207	0.2777
PFZ	11041	0.0128	0.0656	0.0888	11041	0.3512	0.9999	1.2950	0.0381	0.1155	0.1399
POOZ	22889	-0.0348	0.0463	0.0578	22889	-0.5610	1.0649	1.4308	-0.0353	0.0541	0.0641
SFZ	17408	0.1142	0.1508	0.2222	15946	-0.7192	1.1876	1.5723	0.1090	0.1418	0.2043
CAZ	8847	0.2679	0.3244	0.3735	2988	0.5497	0.9074	1.3916	0.1901	0.2917	0.3476
Glob.	94532	0.0166	0.1312	0.1910	86216	-0.4341	1.1837	1.6515	-0.0334	0.1845	0.2788

TABLEAU E.16 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.3.3 R4

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	11655	-0.0521	0.1706	0.2113	11392	-0.7854	1.4052	1.9710	-0.1734	0.3382	0.4341
SAZ	11929	-0.0023	0.0881	0.1067	11929	-0.5638	1.3591	1.9995	-0.0663	0.2135	0.2941
PFZ	9404	0.0658	0.0963	0.1160	9404	-0.2438	0.7205	1.0404	0.0421	0.1166	0.1572
POOZ	18750	-0.0134	0.0549	0.0742	18750	-0.5362	0.7163	0.9640	-0.0432	0.0692	0.0949
SFZ	13629	-0.0121	0.0454	0.0561	13034	-0.7698	1.0958	1.4412	-0.0424	0.0574	0.0710
CAZ	5474	0.0218	0.1306	0.1698	3329	1.1663	1.3895	1.6988	0.0335	0.1222	0.1740
Glob.	71713	0.0000	0.0924	0.1332	67896	-0.5037	1.0512	1.5171	-0.0532	0.1467	0.2350

TABLEAU E.17 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	17920	-0.0663	0.1418	0.1836	17286	-0.4787	1.3127	1.6224	-0.1431	0.3199	0.3839
SAZ	17890	-0.0503	0.1063	0.1372	17890	-0.4810	1.1485	1.5213	-0.1032	0.1827	0.2404
PFZ	13268	0.0383	0.0834	0.0988	13268	-0.0541	1.0337	1.2857	0.0311	0.1111	0.1379
POOZ	25824	-0.0315	0.0624	0.0790	24958	-0.3879	0.6985	1.0038	-0.0540	0.0807	0.0998
SFZ	20157	0.0365	0.0752	0.1192	16998	-0.4976	0.6916	1.0528	0.0227	0.0715	0.1182
CAZ	5275	0.2778	0.3481	0.4620	4640	1.3940	1.3972	1.5815	0.3178	0.3708	0.4916
Glob.	101773	0.0004	0.1057	0.1632	95116	-0.3077	0.9744	1.3152	-0.0356	0.1602	0.2393

TABLEAU E.18 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée interpolées par des NNs ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.4 Généralisation de la solution, Image *sat* composite sous 8 jours

E.2.4.1 R0

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	15719	-0.0213	0.1119	0.1443	11436	-0.2336	0.5124	0.7013	-0.0490	0.1587	0.1999
SAZ	15911	-0.0162	0.0946	0.1087	8484	-0.2942	0.5031	0.6734	-0.0512	0.1280	0.1528
PFZ	11492	0.0516	0.0684	0.0878	5450	-0.4759	0.5983	0.8883	0.0408	0.0923	0.1180
POOZ	22943	-0.0093	0.0395	0.0471	4162	-0.3070	0.3326	0.4431	-0.0013	0.0347	0.0421
SFZ	8785	-0.0033	0.0656	0.0939	112	-0.3937	0.4049	0.4355	0.0250	0.0278	0.0285
CAZ	0	NaN	NaN	NaN	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	75703	0.0000	0.0763	0.1046	29694	-0.3058	0.4997	0.7017	-0.0255	0.1202	0.1584

TABLEAU E.19 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	19760	-0.0293	0.0993	0.1318	15098	-0.0009	0.5246	0.7056	-0.0290	0.1524	0.1973
SAZ	19356	-0.0669	0.1150	0.1287	12155	-0.2783	0.4868	0.7950	-0.1049	0.1499	0.1701
PFZ	13969	0.0144	0.0857	0.1032	7846	-0.1304	0.6355	0.8791	-0.0034	0.0960	0.1277
POOZ	30114	-0.0439	0.0597	0.0933	5173	-0.3744	0.5569	0.8381	-0.0636	0.0766	0.0973
SFZ	10131	-0.0510	0.1127	0.1349	400	-0.2706	0.2924	0.3344	-0.0513	0.1302	0.1532
CAZ	821	-0.1842	0.1842	0.1965	0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
Glob.	94993	-0.0365	0.0913	0.1194	40738	-0.1581	0.5367	0.7830	-0.0509	0.1311	0.1669

TABLEAU E.20 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R0 avec des images *sat* composite sous 8 jours ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.4.2 R2

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	14178	-0.0295	0.1552	0.1959	12255	-0.0893	0.5991	0.8368	-0.0406	0.1973	0.2565
SAZ	15007	-0.0215	0.0719	0.0968	11321	-0.2801	0.6270	0.8990	-0.0490	0.1127	0.1477
PFZ	11663	0.0575	0.0688	0.0865	8303	-0.3656	0.5660	0.7473	0.0426	0.0708	0.0878
POOZ	22831	-0.0231	0.0473	0.0590	12007	-0.4198	0.5540	0.7264	-0.0398	0.0500	0.0649
SFZ	16904	0.0475	0.0916	0.1403	3385	-0.3384	0.5056	0.6602	0.0613	0.1044	0.1347
CAZ	5762	-0.0913	0.1943	0.2304	498	0.2236	0.6946	0.9982	0.0414	0.0909	0.1097
Glob.	86949	-0.0000	0.0938	0.1402	47816	-0.2798	0.5829	0.8011	-0.0195	0.1108	0.1614

TABLEAU E.21 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	16743	-0.0671	0.1613	0.1949	12783	0.1589	0.6090	0.8706	-0.0282	0.1931	0.2414
SAZ	16527	-0.0802	0.1271	0.1583	12423	-0.1428	0.3600	0.5340	-0.0847	0.1309	0.1686
PFZ	11041	0.0128	0.0656	0.0888	7343	-0.0960	0.4955	0.7387	0.0115	0.0745	0.0955
POOZ	22889	-0.0348	0.0463	0.0578	13330	-0.2036	0.3596	0.5032	-0.0339	0.0417	0.0522
SFZ	17408	0.1142	0.1508	0.2222	6249	-0.3558	0.4831	0.6800	0.0790	0.1198	0.1754
CAZ	8847	0.2679	0.3244	0.3735	291	-0.1993	0.3305	0.4806	0.2115	0.2506	0.3323
Glob.	94532	0.0166	0.1312	0.1910	52497	-0.1033	0.4542	0.6704	-0.0229	0.1151	0.1652

TABLEAU E.22 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R2 avec des images *sat* composite sous 8 jours ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.2.4.3 R4

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	11655	-0.0521	0.1706	0.2113	8649	0.0882	0.6156	0.8870	-0.0256	0.1931	0.2423
SAZ	11929	-0.0023	0.0881	0.1067	9085	-0.1293	0.4203	0.5541	-0.0121	0.1056	0.1298
PFZ	9404	0.0658	0.0963	0.1160	6602	-0.3611	0.4350	0.5902	0.0356	0.0869	0.1068
POOZ	18750	-0.0134	0.0549	0.0742	13369	-0.3948	0.4118	0.4813	-0.0436	0.0617	0.0850
SFZ	13629	-0.0121	0.0454	0.0561	4405	-0.3810	0.4469	0.5491	-0.0220	0.0529	0.0626
CAZ	5474	0.0218	0.1306	0.1698	116	-0.6409	0.7699	0.9379	-0.0348	0.0477	0.0671
Glob.	71713	0.0000	0.0924	0.1332	42282	-0.2324	0.4636	0.6235	-0.0181	0.1012	0.1421

TABLEAU E.23 – Résumé des résultats de modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* d'une journée ; création du modèle et validation avec les données *sat* correspondant aux données *in situ* utilisées dans la création du modèle.

Zones	Données <i>in situ</i>				Données <i>sat</i>						
	Nb	MBE _S	MAE _S	RMSE _S	Nb	MBE _T	MAE _T	RMSE _T	MBE _S	MAE _S	RMSE _S
STZ	17920	-0.0663	0.1418	0.1836	12971	0.2029	0.5846	0.8131	-0.0093	0.1700	0.2234
SAZ	17890	-0.0503	0.1063	0.1372	12596	-0.0302	0.4210	0.6088	-0.0372	0.1154	0.1526
PFZ	13268	0.0383	0.0834	0.0988	8015	-0.1424	0.3326	0.5184	0.0221	0.0812	0.1017
POOZ	25824	-0.0315	0.0624	0.0790	10529	-0.3329	0.4199	0.7237	-0.0507	0.0736	0.0949
SFZ	20157	0.0365	0.0752	0.1192	5393	-0.2926	0.4251	0.6157	0.0094	0.0674	0.0867
CAZ	5275	0.2778	0.3481	0.4620	134	-0.3028	0.4831	0.5269	0.0903	0.1307	0.2322
Glob.	101773	0.0004	0.1057	0.1632	49708	-0.0803	0.4498	0.6804	-0.0175	0.1102	0.1534

TABLEAU E.24 – Résumé des résultats du test de la modélisation de la salinité pour R4 avec des images *sat* composite sous 8 jours ; test avec les données *in situ* de la partie test de la base de données et test avec les données *sat* correspondant à ces données *in situ*.

E.3 Cartes de salinité produites

Nous présentons dans cette annexe toutes les cartes de salinité produite grâce aux modèles développés.

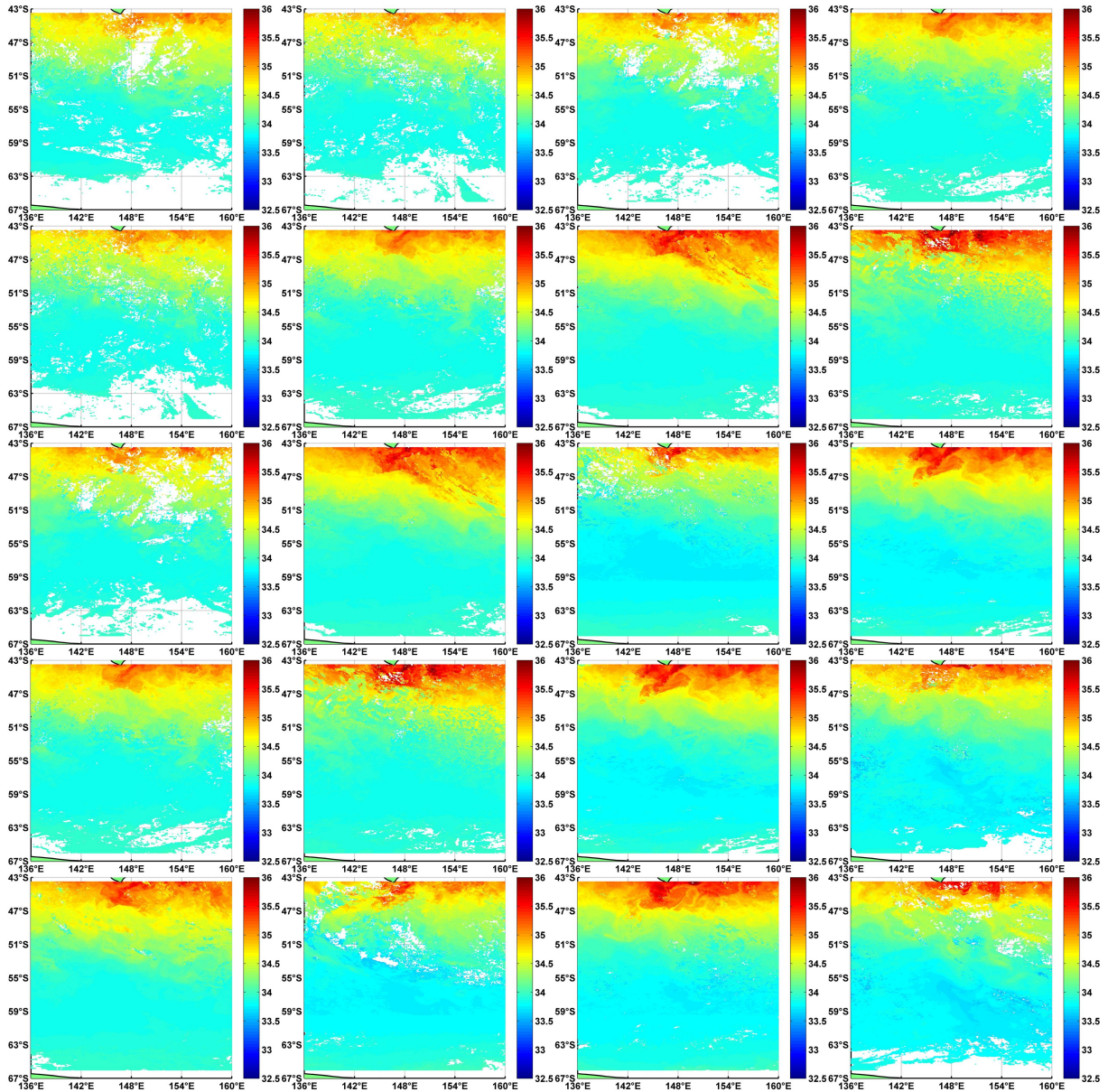


FIGURE E.1 – Evolution de la salinité entre Octobre 2002 et Mars 2003 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

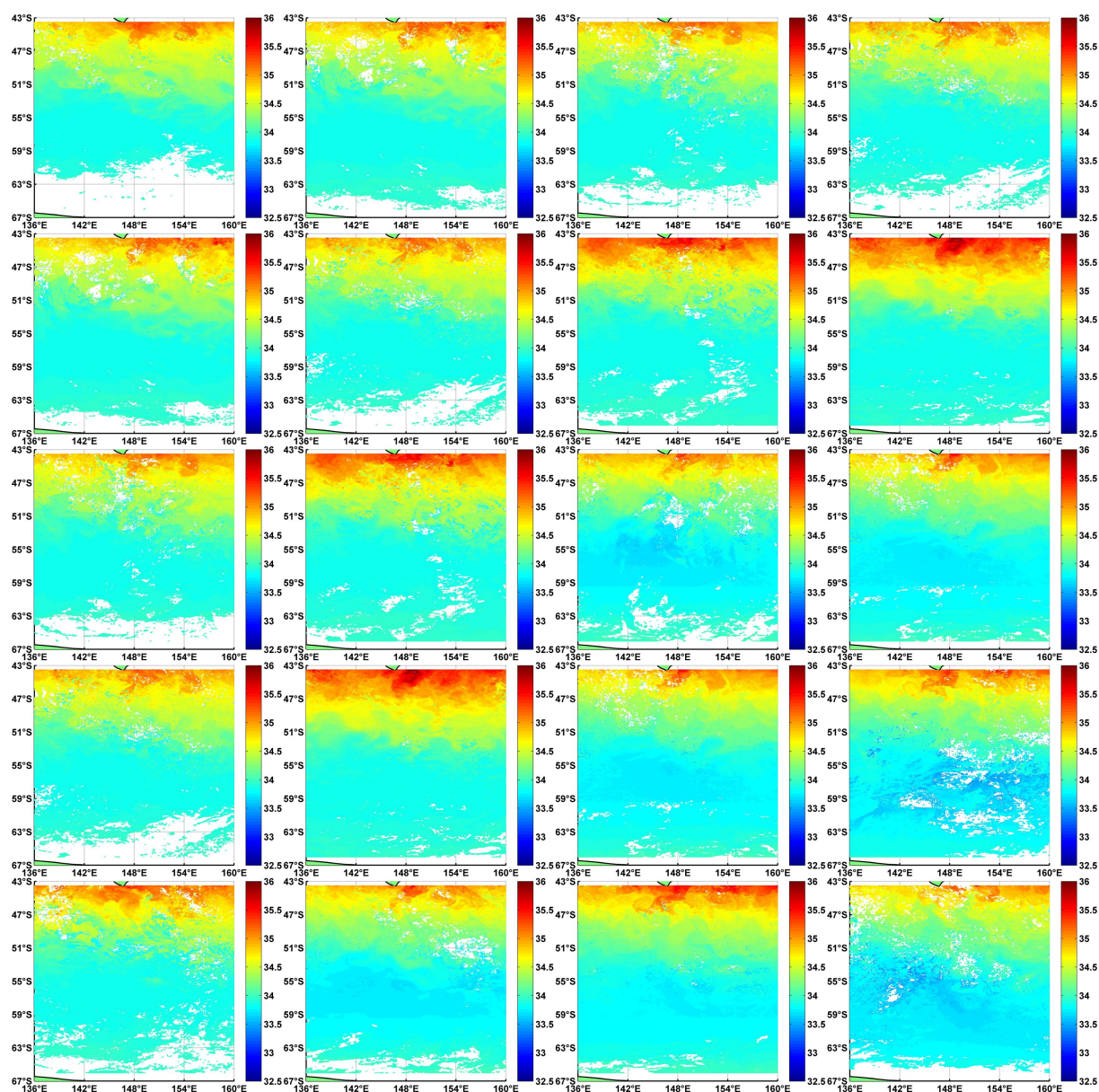


FIGURE E.2 – Evolution de la salinité entre Octobre 2003 et Mars 2004 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

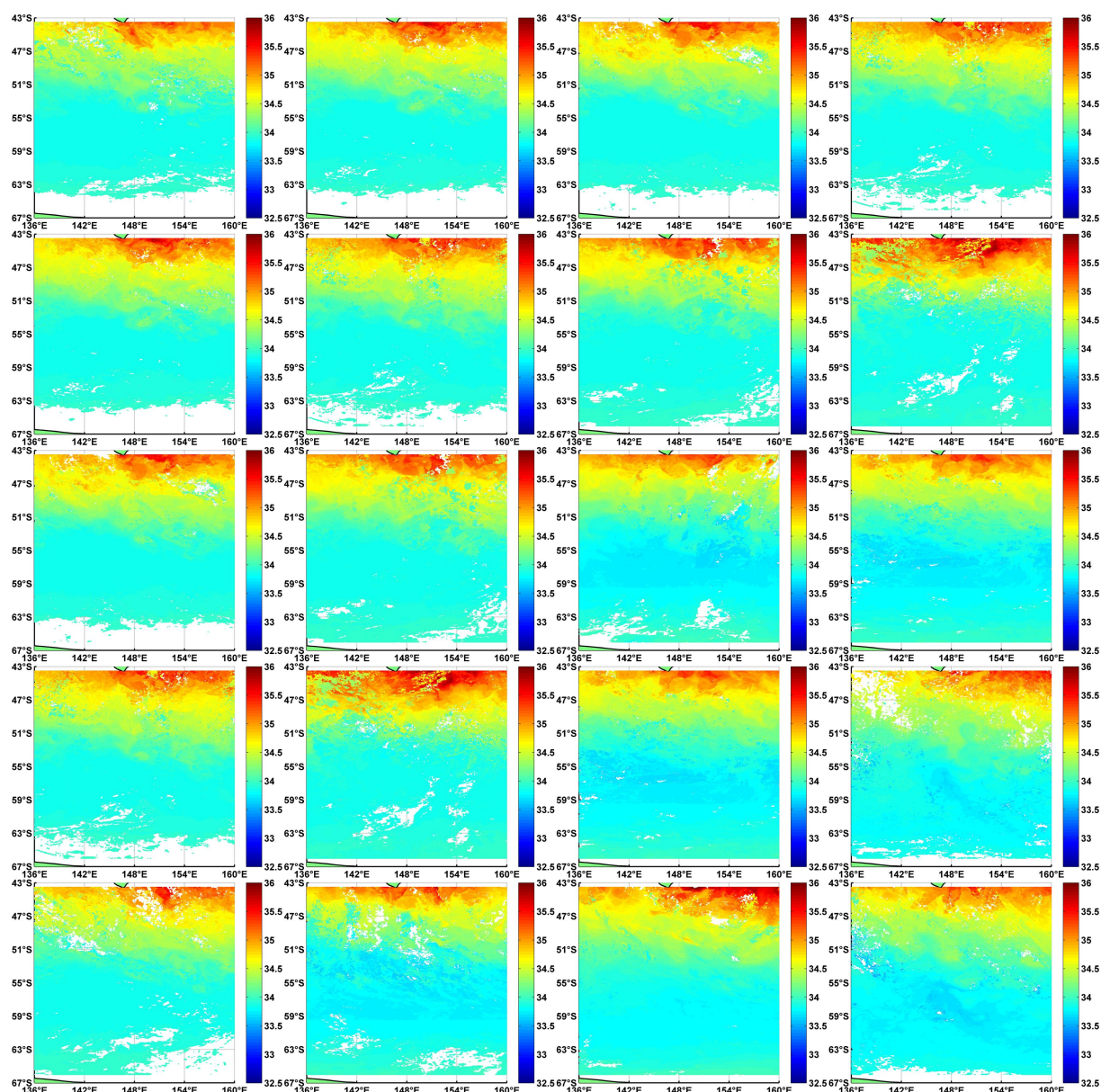


FIGURE E.3 – Evolution de la salinité entre Octobre 2004 et Mars 2005 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

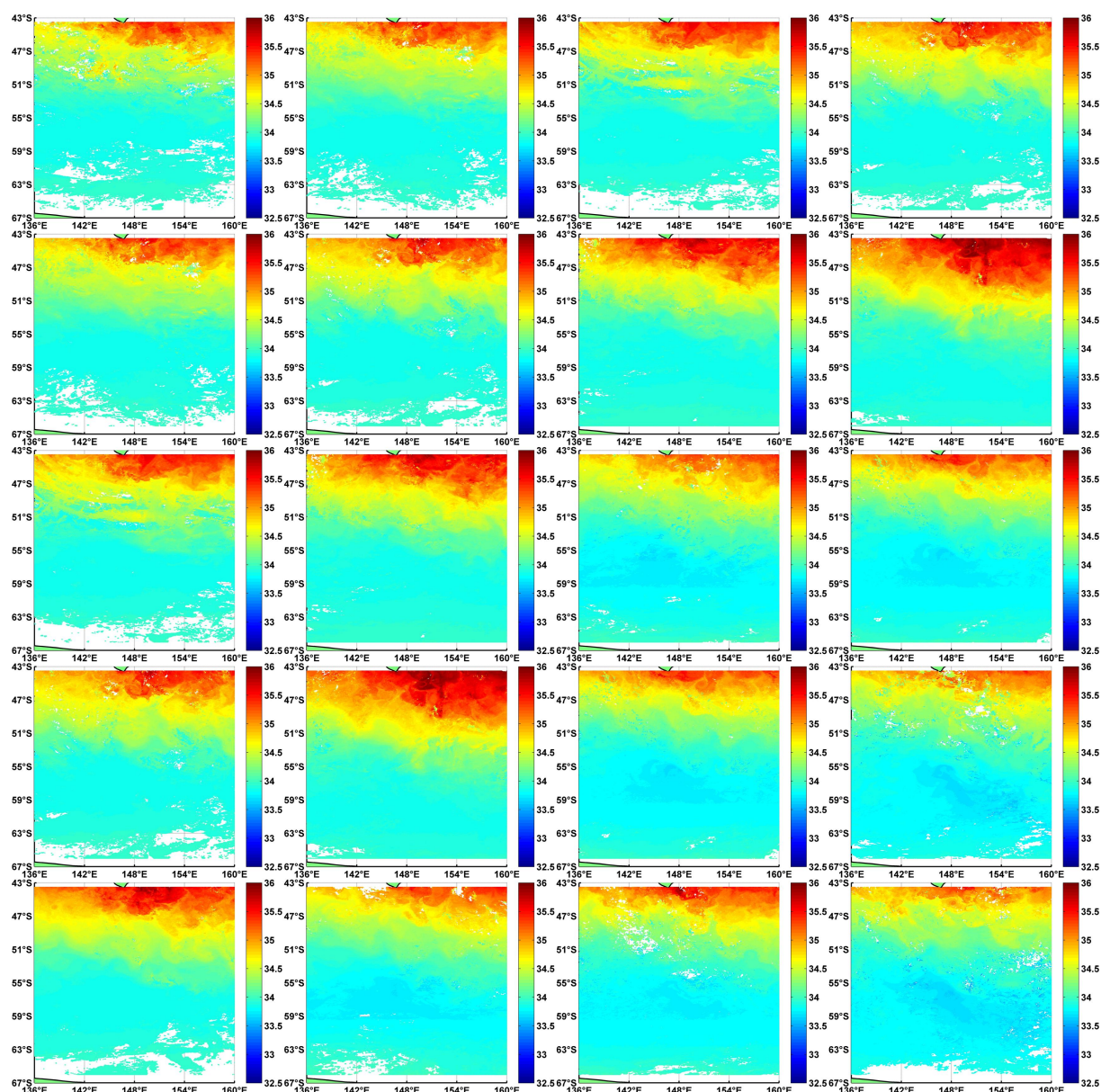


FIGURE E.4 – Evolution de la salinité entre Octobre 2005 et Mars 2006 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

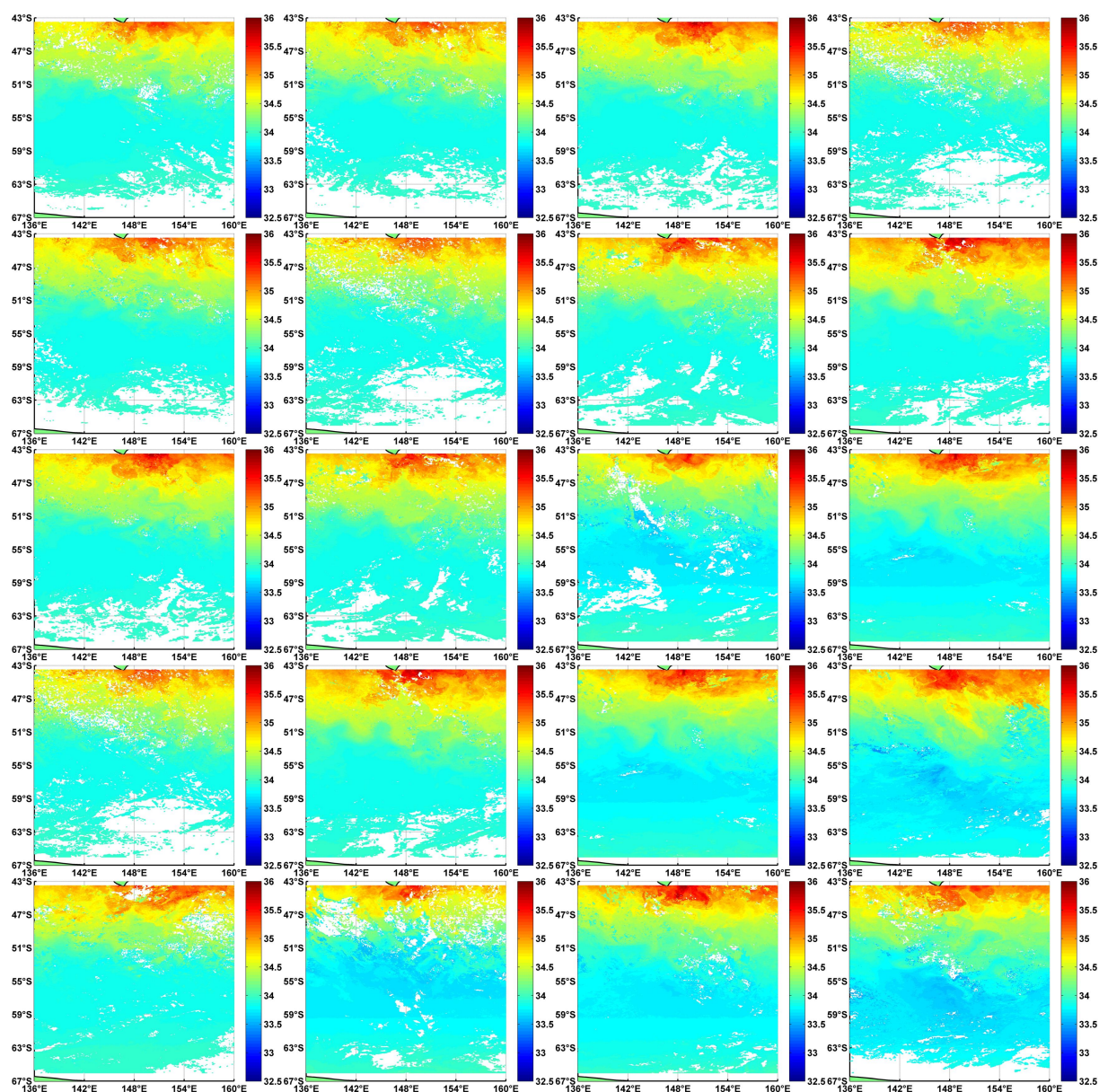


FIGURE E.5 – Evolution de la salinité entre Octobre 2006 et Mars 2007 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

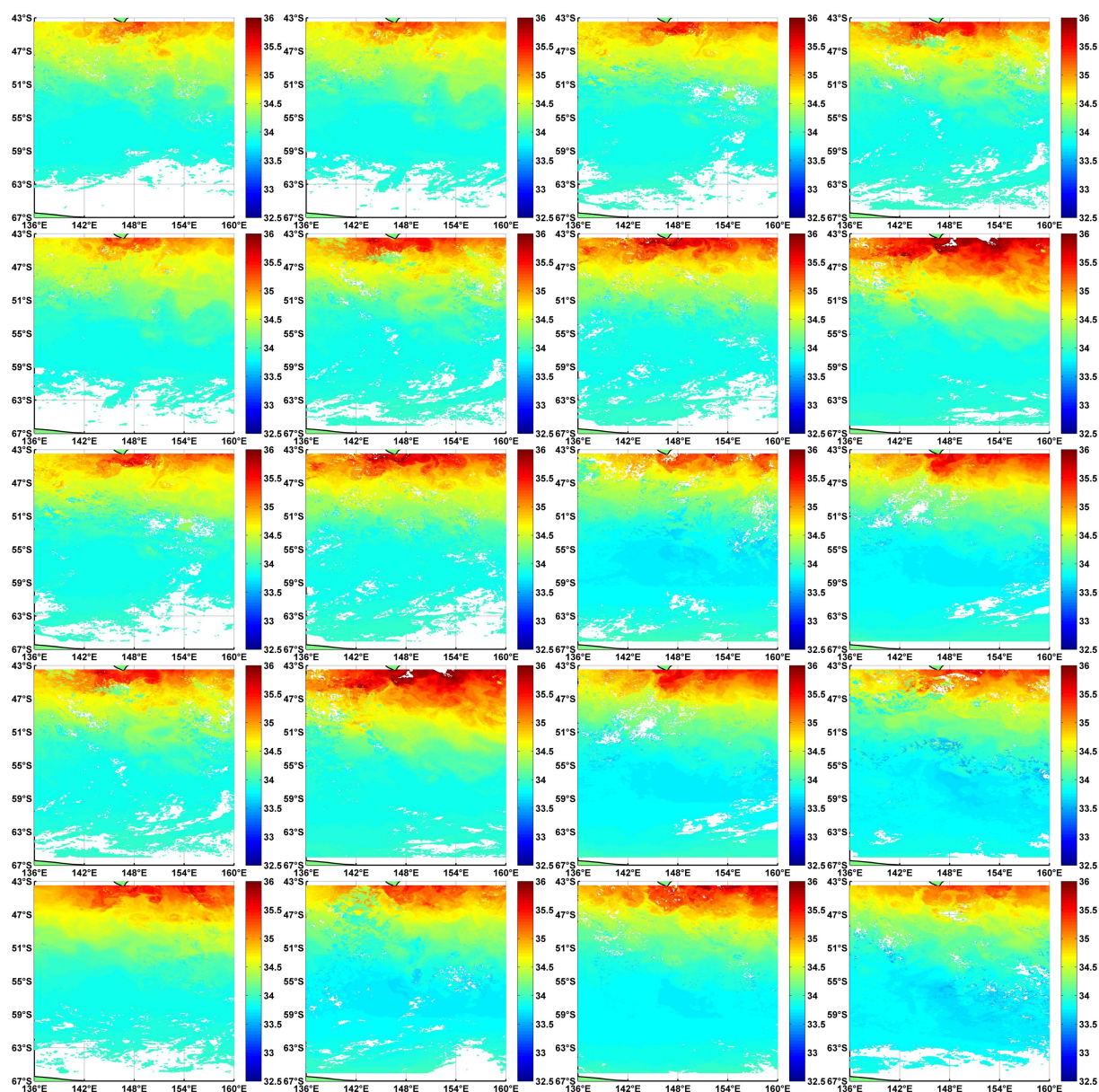


FIGURE E.6 – Evolution de la salinité entre Octobre 2007 et Mars 2008 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

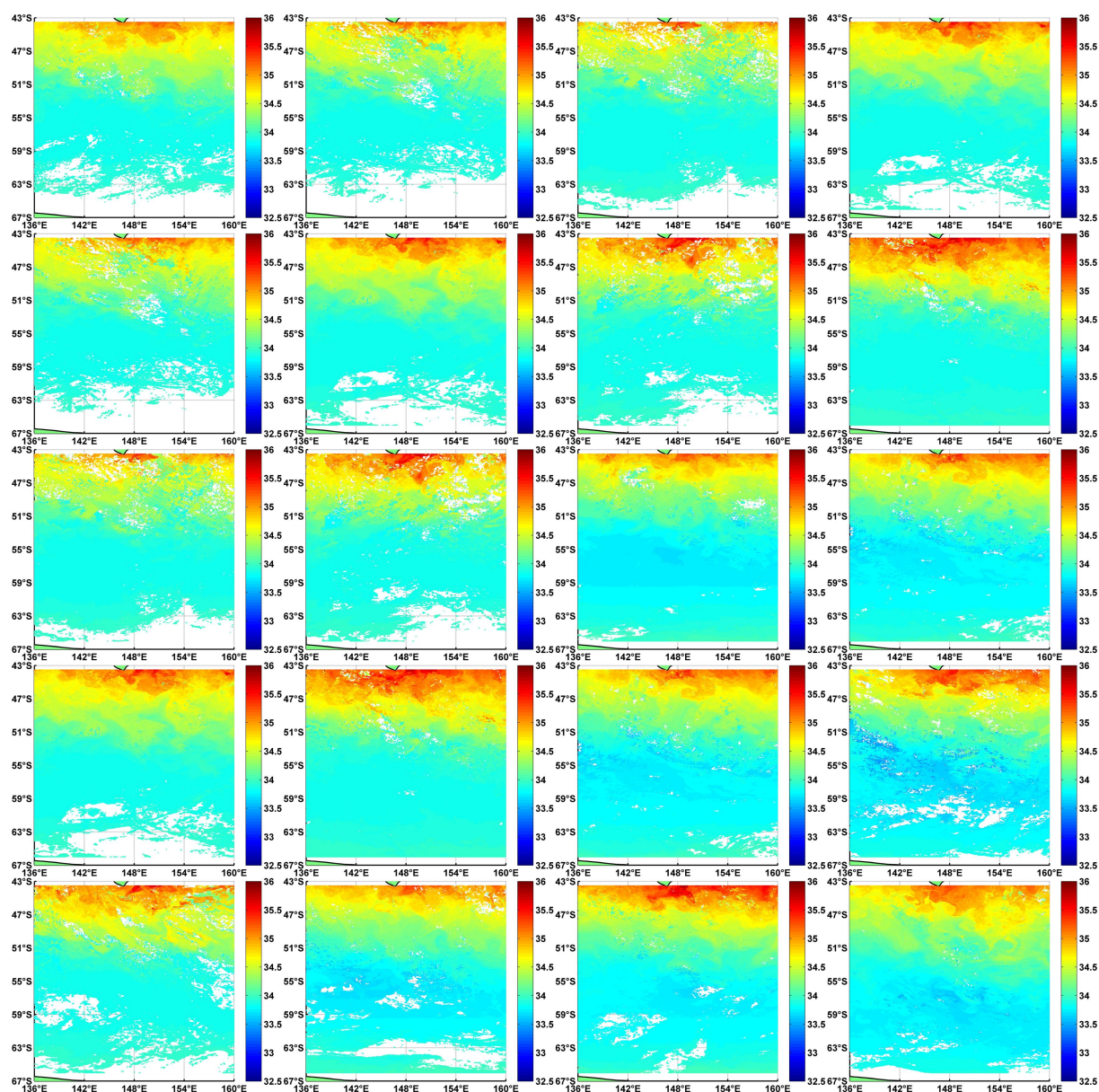


FIGURE E.7 – Evolution de la salinité entre Octobre 2008 et Mars 2009 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

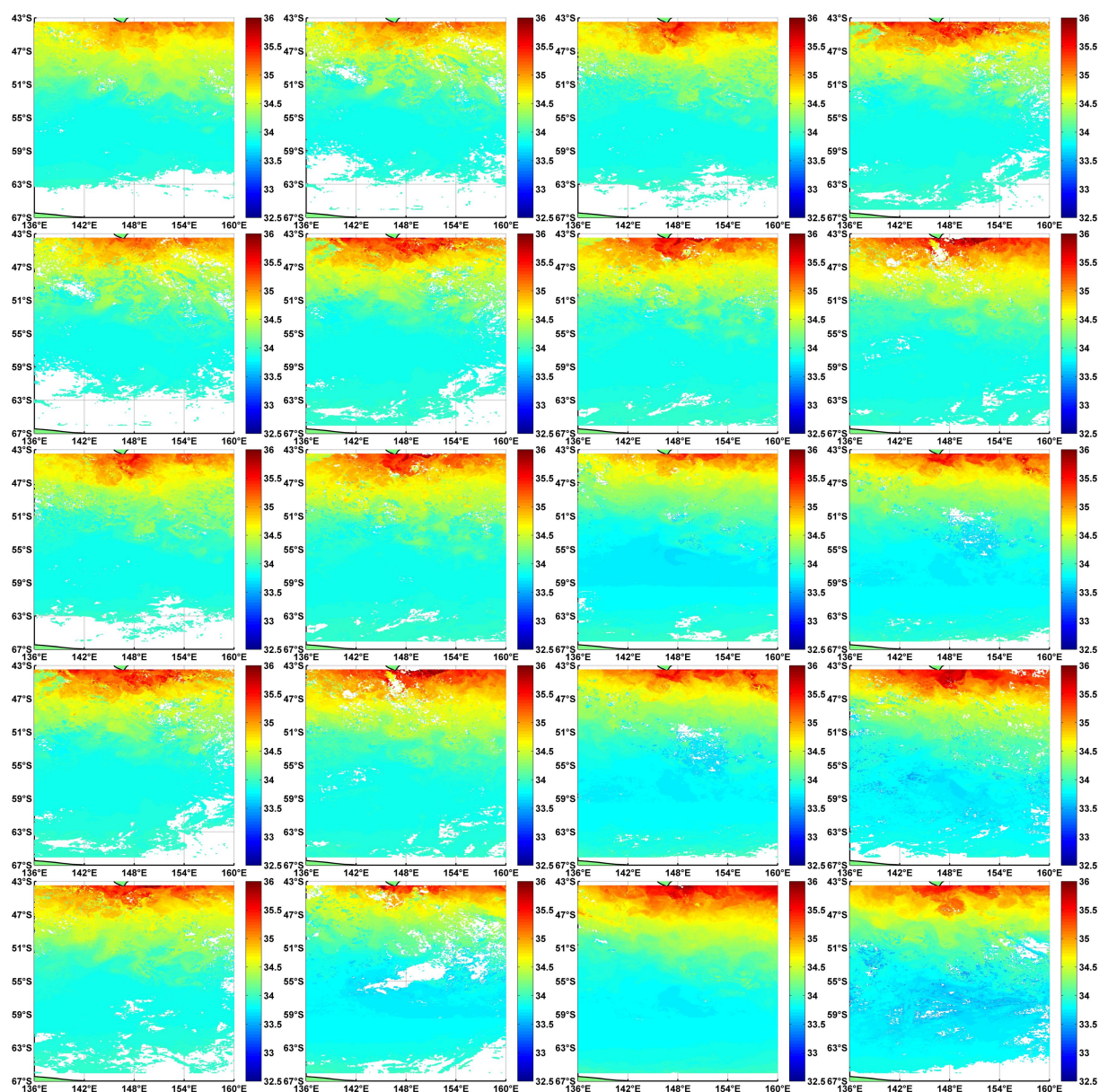


FIGURE E.8 – Evolution de la salinité entre Octobre 2009 et Mars 2010 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

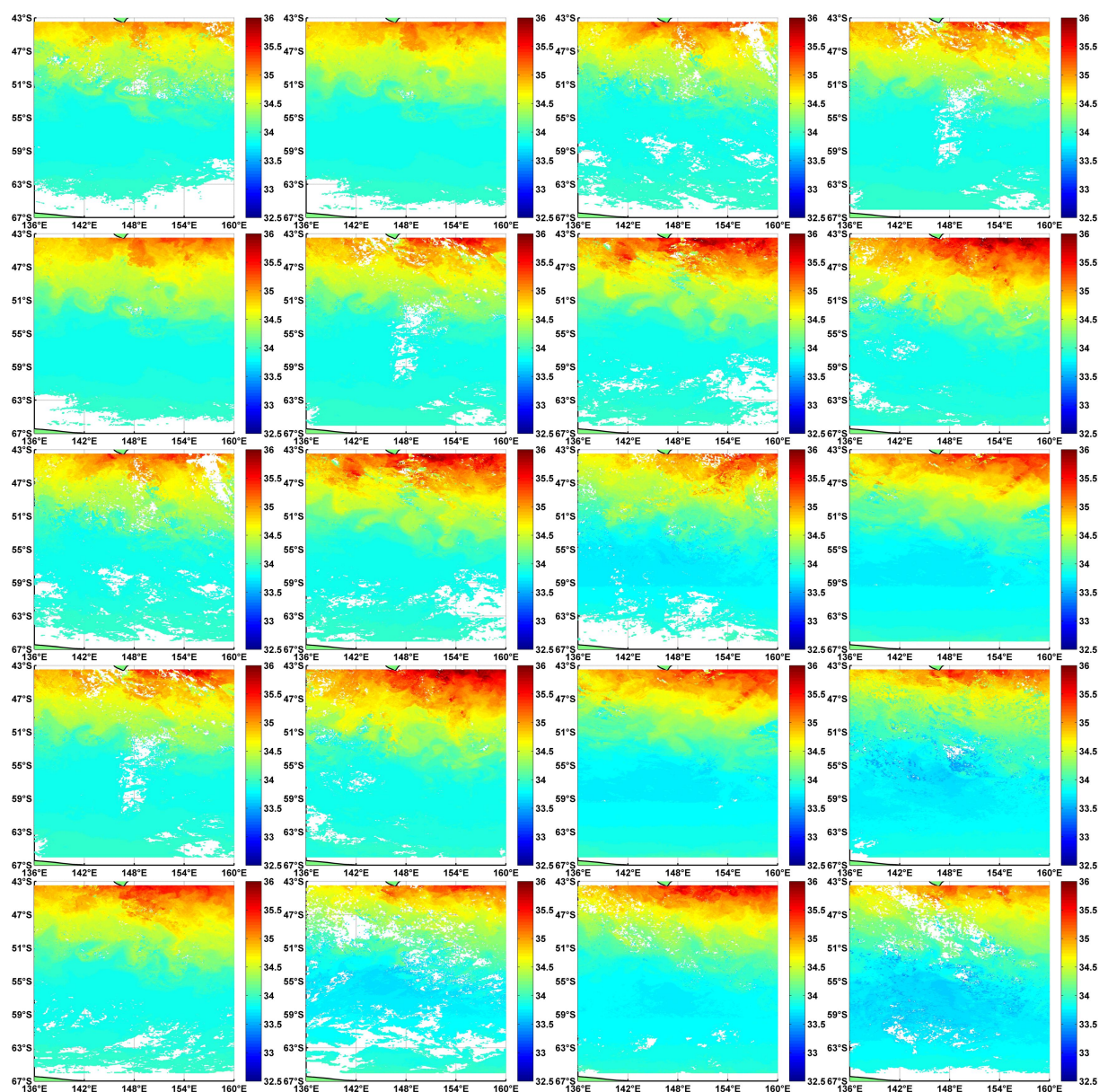


FIGURE E.9 – Evolution de la salinité entre Octobre 2010 et Mars 2011 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

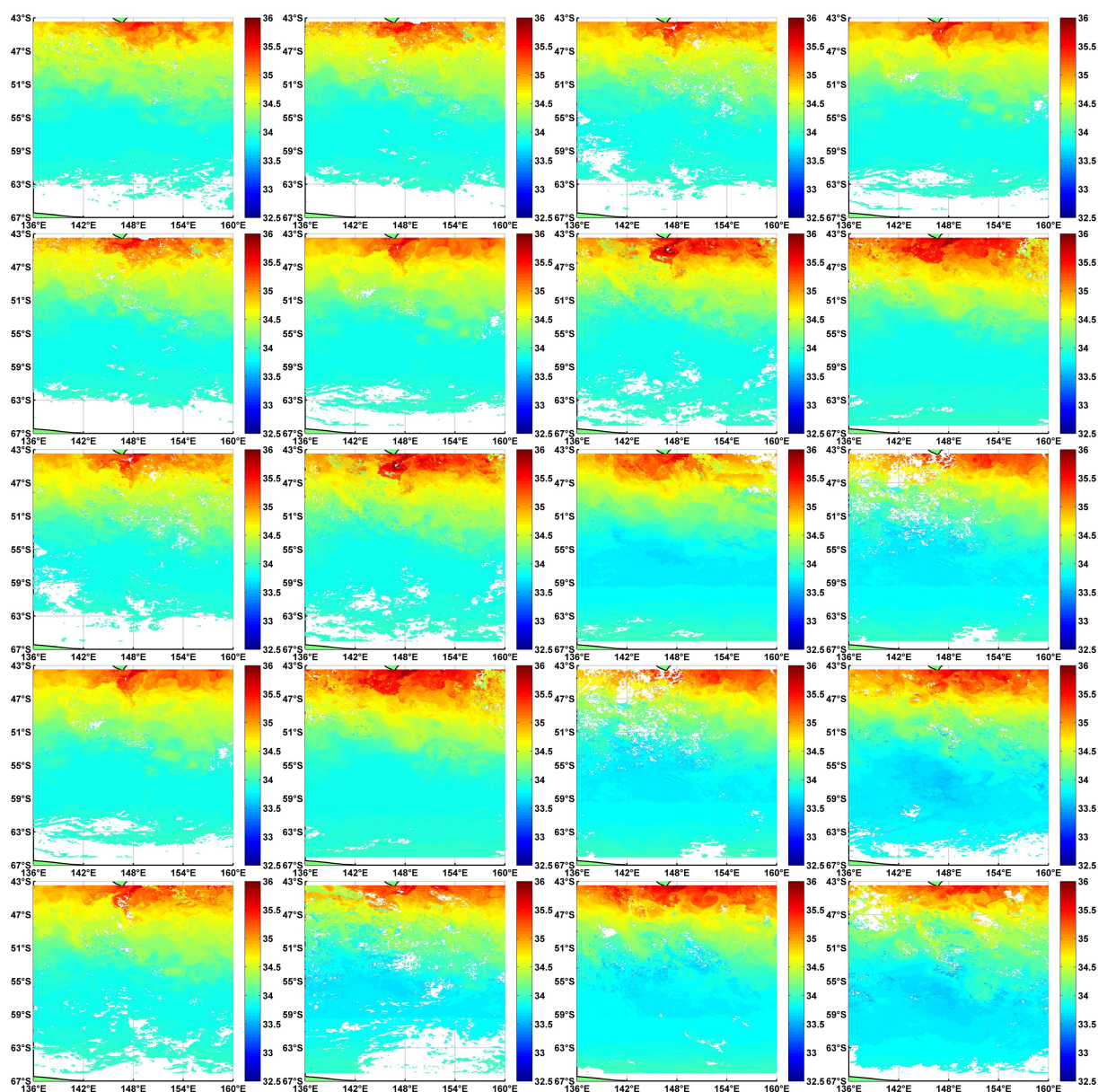


FIGURE E.10 – Evolution de la salinité entre Octobre 2011 et Mars 2012 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

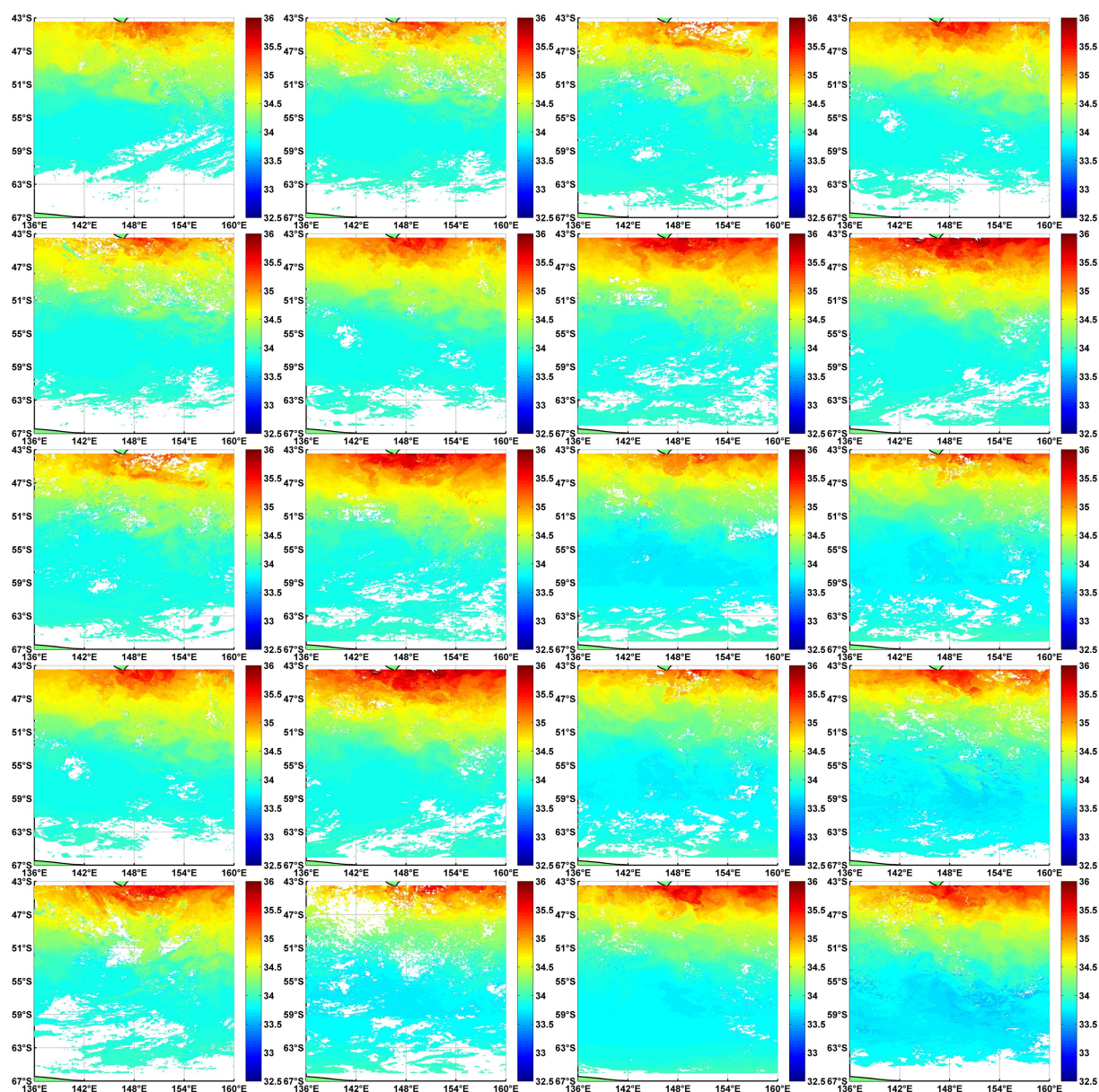


FIGURE E.11 – Evolution de la salinité entre Octobre 2012 et Mars 2013 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

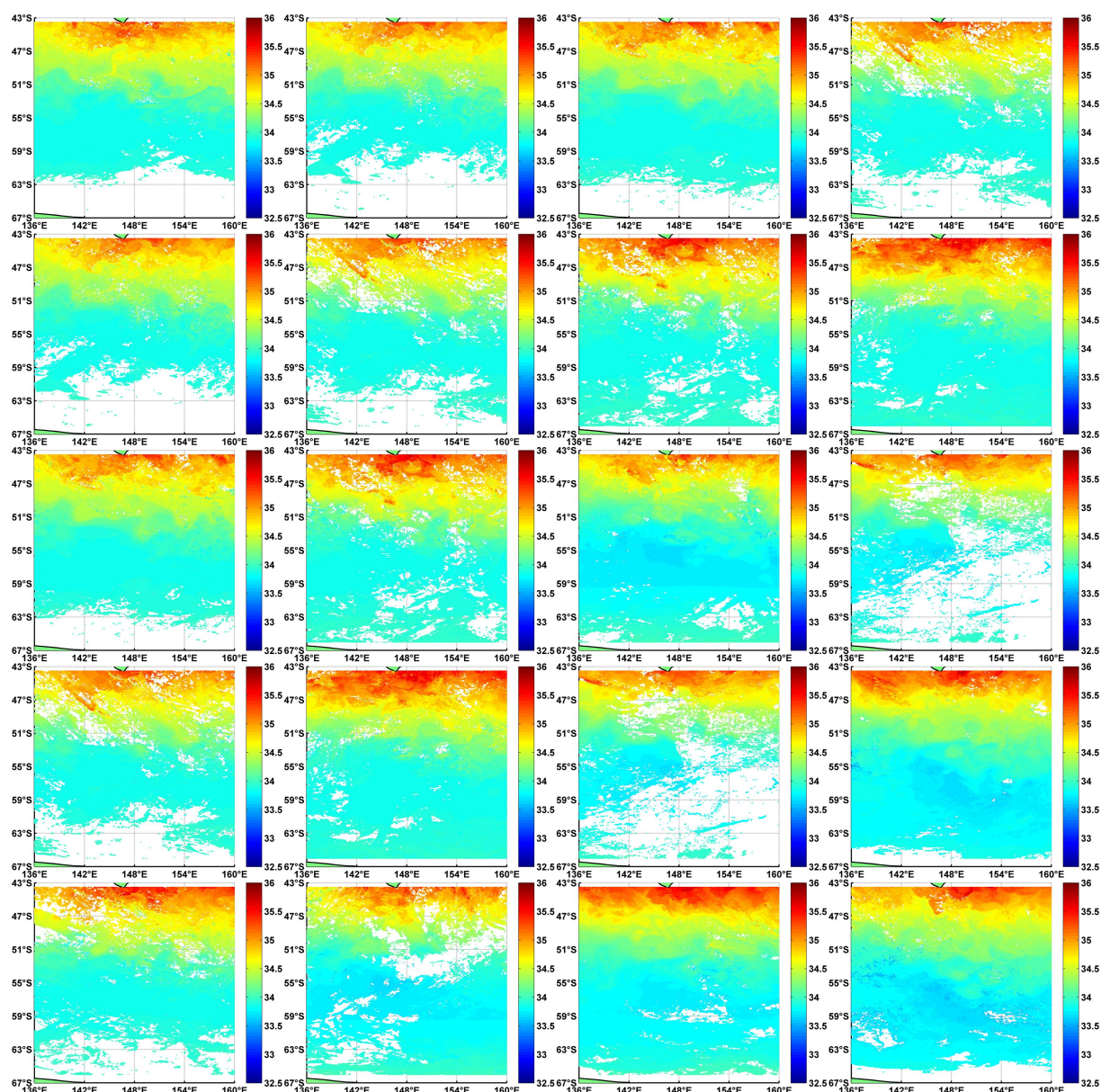


FIGURE E.12 – Evolution de la salinité entre Octobre 2013 et Mars 2014 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

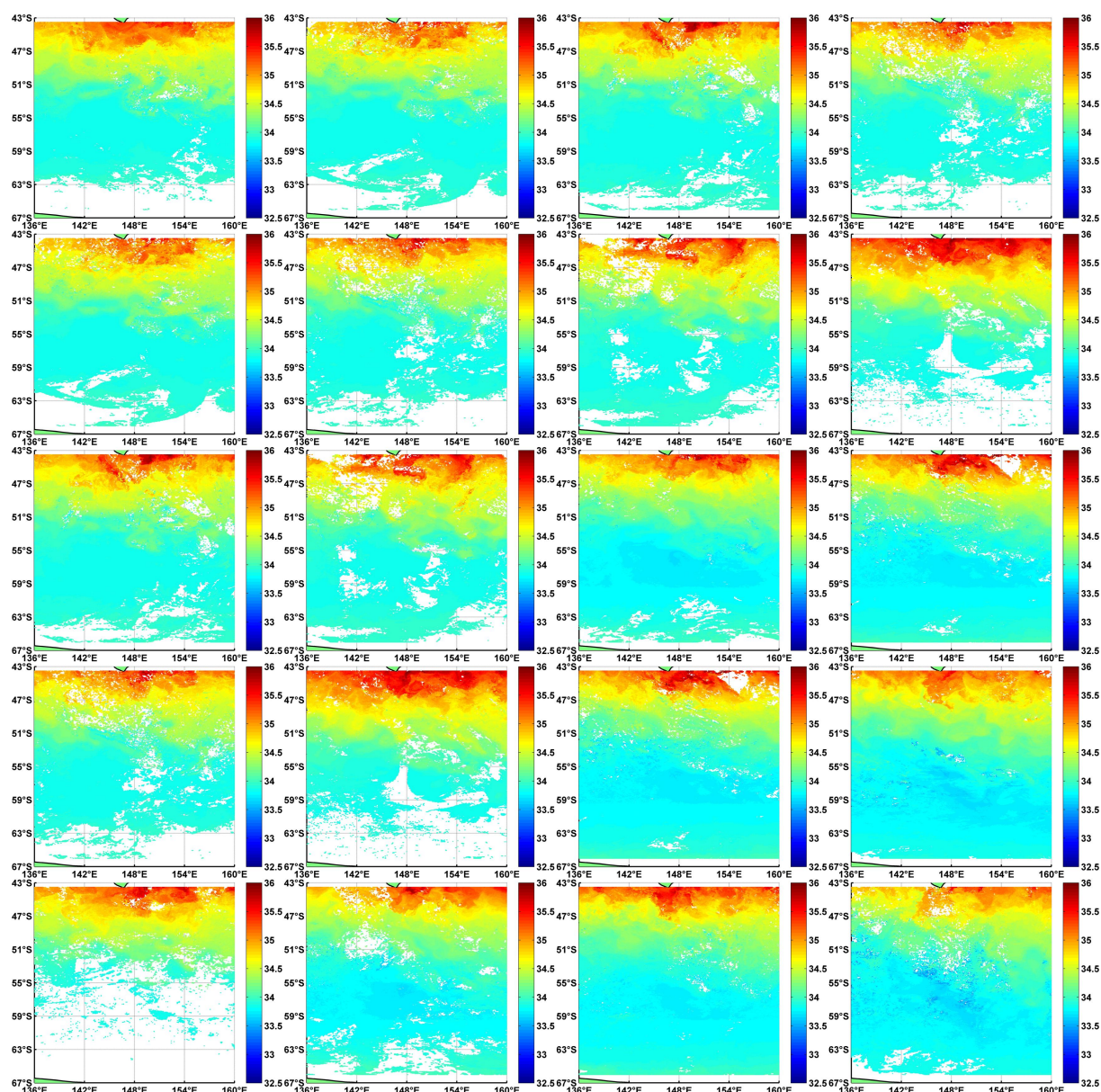


FIGURE E.13 – Evolution de la salinité entre Octobre 2014 et Mars 2015 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

Annexe F

Modélisation de la fugacité du CO₂

F.1 Equations correspondantes aux FNNs de $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ produits pour chaque rotation

Nous avons utilisé dans cette thèse MatlabTM pour construire les FNNs pour l'estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$; cela implique qu'une personne ne disposant pas de Matlab ne peut utiliser les FNNs produit. Nous avons donc développé un code spécifique qui prend en charge le FNN obtenu avec MatlabTM puis le transforme en une équation en utilisant tout les coefficients (poids synaptiques, biais, etc.), ce code source est a retrouvé dans l'annexe D.6 . L'algorithme LMA utilisé dans cette thèse produit des FNNs pour chaque rotations, ainsi on peut écrire la sortie de chaque FNN de cette manière :

$$\begin{aligned} f\text{CO}_2^{\text{eau}} &= (v + \sum_{i=1}^j a_i * \text{tansig}(b_i * ((e - f) * (\text{SST} - h)/(g - h) + f) \\ &+ c_i * ((e - f) * (\text{Chl}_a - l)/(k - l) + f) + d_i) \\ &- m) * (n - o)/(p - m) + o \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

avec $a_i, b_i, c_i, d_i (i = 1..j)$ (j étant le nombre de neurones dans la couche cachée) :

— Pour R0 : $j = 17$ et

$a1 = 0.87068; a2 = -1.4177; a3 = -0.33914; a4 = -2.2047; a5 = 1.8184; a6 = -0.70071; a7 = 3.5171; a8 = 3.9405; a9 = -1.9046; a10 = -0.68289; a11 = -1.232; a12 = 5.7002; a13 = -11.8263; a14 = -2.2547; a15 = -1.12; a16 = 0.61584; a17 = -4.9204.$

$b1 = -0.30373; b2 = -3.6157; b3 = 3.3106; b4 = -3.6086; b5 = -1.5005; b6 = -0.76551; b7 = 0.0065776; b8 = -2.9087; b9 = -4.7407; b10 = 5.6674; b11 = 1.7442; b12 = -2.5858; b13 = -2.2139; b14 = 2.8503; b15 = 6.2876; b16 = -7.9432; b17 = 2.2909.$

$c1 = 6.002; c2 = 0.01015; c3 = 5.3051; c4 = 5.2076; c5 = -6.1854; c6 = 6.0521; c7 = -1.5938; c8 = 3.7118; c9 = 1.1992; c10 = 5.131; c11 = -4.8047; c12 = -5.81; c13 = -3.1188; c14 = -5.3747; c15 = -5.6819; c16 = 10.8187; c17 = -0.049472.$

$$d1 = -5.5974; d2 = 3.2192; d3 = -3.7006; d4 = 4.2099; d5 = 7.021; d6 = -3.5862; d7 = -1.207; d8 = 3.3121; d9 = 1.7895; d10 = 3.7502; d11 = 3.641; d12 = -6.9762; d13 = -4.243; d14 = 3.55; d15 = -9.7511; d16 = 1.8546; d17 = 1.2072.$$

$$e = 1; f = -1; g = 15, 7280000000000; h = -1, 696; k = 2, 39731001853943; l = 0, 0725700035691261; m = -1; n = 416, 910; o = 296, 690; p = 1; v = 0.71779.$$

— Pour R2 : $j = 39$ et

$$a1 = 1.1911; a2 = -0.54268; a3 = -0.55992; a4 = 1.0417; a5 = -0.43628; a6 = -1.9003; a7 = 0.64564; a8 = 1.7229; a9 = 0.25457; a10 = 0.080179; a11 = 2.7357; a12 = 0.18116; a13 = 0.19439; a14 = -0.71034; a15 = -0.17328; a16 = -0.49376; a17 = -0.42923; a18 = 0.53964; a19 = -0.64439; a20 = -0.29047; a21 = 0.77045; a22 = 1.5142; a23 = -0.5832; a24 = -0.15489; a25 = 0.33956; a26 = 2.1485; a27 = -0.44638; a28 = 0.50896; a29 = 2.556; a30 = -0.28279; a31 = 3.5027; a32 = 1.3421; a33 = -3.2578; a34 = -0.8621; a35 = -0.0034143; a36 = 0.62129; a37 = -0.61976; a38 = -0.73454; a39 = -0.73399.$$

$$b1 = -6.0058; b2 = -3.0231; b3 = -7.431; b4 = -3.2665; b5 = 7.9425; b6 = 0.21525; b7 = -9.2555; b8 = -1.9628; b9 = 1.9503; b10 = -7.4885; b11 = 5.8666; b12 = -13.7356; b13 = 11.3468; b14 = 3.8508; b15 = -9.3898; b16 = 8.2435; b17 = -7.4717; b18 = -0.12398; b19 = -8.2179; b20 = 3.0756; b21 = -3.2094; b22 = 9.2827; b23 = -4.3472; b24 = -19.8173; b25 = 2.5676; b26 = -7.8677; b27 = 0.44074; b28 = 4.174; b29 = 6.5897; b30 = 6.4593; b31 = -6.3021; b32 = -2.9737; b33 = -8.0483; b34 = 14.3103; b35 = -4.8141; b36 = -12.7477; b37 = -6.6653; b38 = 7.7436; b39 = -6.346.$$

$$c1 = -5.7396; c2 = 16.3213; c3 = -2.7543; c4 = 8.2417; c5 = -5.7821; c6 = -9.0212; c7 = -13.7381; c8 = -8.7261; c9 = -0.61622; c10 = 5.3905; c11 = 3.9578; c12 = 6.9265; c13 = 5.646; c14 = 10.0641; c15 = -5.998; c16 = 0.79619; c17 = -0.74917; c18 = 5.4606; c19 = -4.6672; c20 = 8.1507; c21 = -3.8303; c22 = 1.3852; c23 = 8.342; c24 = 6.5382; c25 = -7.9688; c26 = -9.6703; c27 = 7.5528; c28 = -7.8081; c29 = 7.1012; c30 = 5.8143; c31 = 4.0097; c32 = 8.2314; c33 = 6.2849; c34 = 2.2504; c35 = 7.2956; c36 = -13.3147; c37 = 4.2541; c38 = -3.7761; c39 = -15.1014.$$

$$d1 = 6.7188; d2 = 14.548; d3 = 8.551; d4 = 9.6212; d5 = -8.6005; d6 = -8.2739; d7 = 8.3651; d8 = -8.4342; d9 = -1.359; d10 = 5.8115; d11 = -5.2859; d12 = 7.4738; d13 = -6.3343; d14 = -4.8335; d15 = 2.9289; d16 = -2.3831; d17 = 1.2155; d18 = 3.5799; d19 = 0.93874; d20 = -0.24449; d21 = -0.58611; d22 = 7.8285; d23 = -3.0457; d24 = 0.054056; d25 = -6.7567; d26 = -11.4418; d27 = 4.7578; d28 = 3.4958; d29 = 8.4291; d30 = 4.4619; d31 = -5.867; d32 = -5.4029; d33 = -7.5206; d34 = 11.9811; d35 = -6.9074; d36 = -14.9058; d37 = -8.876; d38 = 8.3562; d39 = -15.6648.$$

$$e = 1; f = -1; g = 18, 166; h = -1, 178; k = 1, 47134995460510; l = 0, 0432600006461144; m = -1; n = 401, 270; o = 285, 180; p = 1; v = -0.63865.$$

— Pour R4 : $j = 16$ et

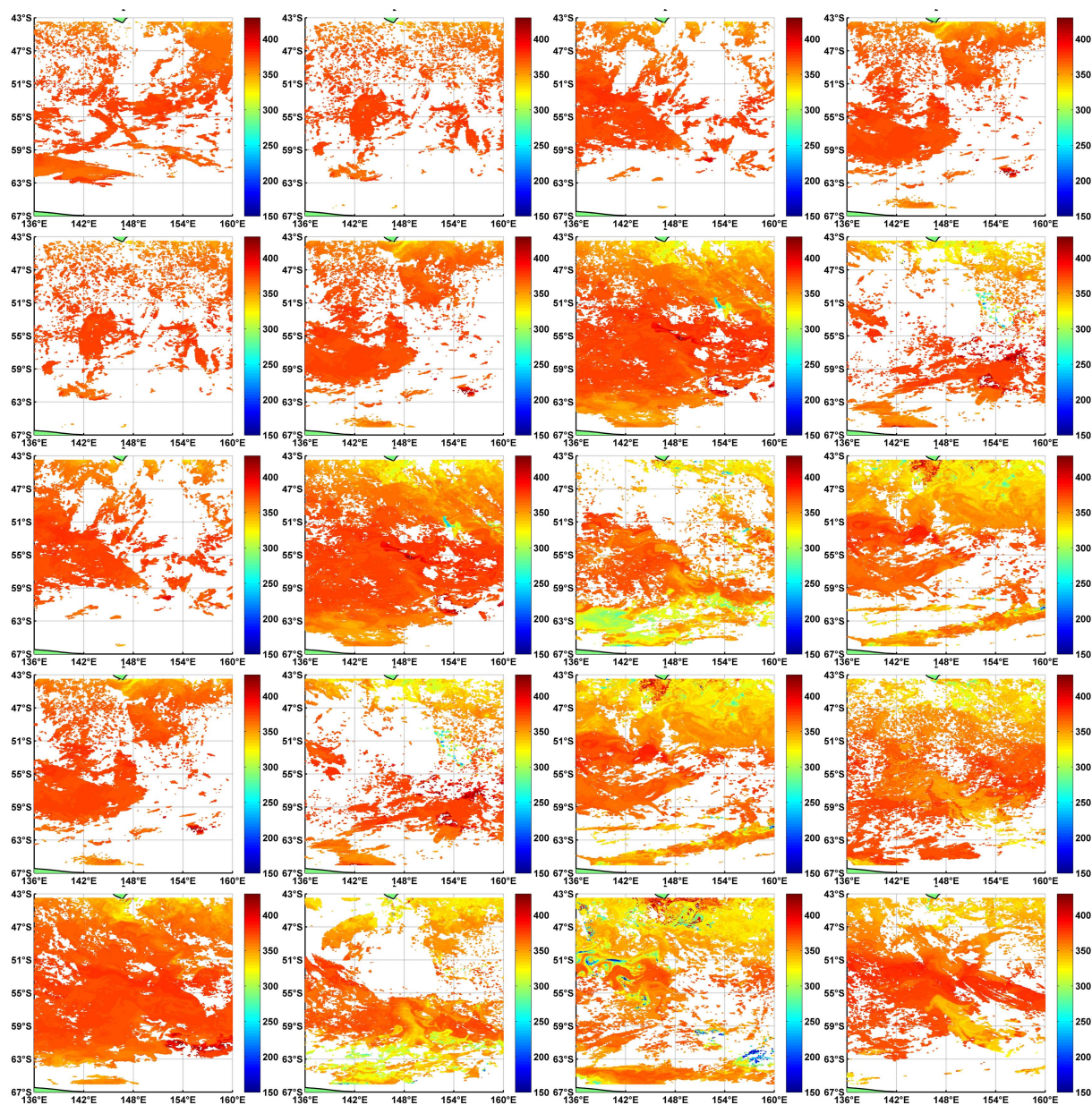
$a1 = -0.77769; a2 = -1.7799; a3 = -1.6348; a4 = 1.5756; a5 = 0.012624; a6 = -0.11184; a7 = -0.14768; a8 = -0.26292; a9 = -2.0653; a10 = 2.2352; a11 = 0.051906; a12 = 0.12919; a13 = 0.043458; a14 = -1.6331; a15 = 0.15365; a16 = -0.18624.$

$b1 = 8.2937; b2 = 7.9435; b3 = -7.964; b4 = 4.8674; b5 = -22.1003; b6 = -19.5714; b7 = 9.4037; b8 = -28.5724; b9 = -0.75568; b10 = -1.0042; b11 = 8.155; b12 = 8.3688; b13 = 5.9083; b14 = 5.0337; b15 = 18.2573; b16 = -7.4388.$

$c1 = 1.251; c2 = -1.147; c3 = 1.4963; c4 = -17.4221; c5 = 7.9127; c6 = -19.0123; c7 = 0.22309; c8 = -10.4605; c9 = -14.8588; c10 = -13.935; c11 = -23.2895; c12 = -12.5742; c13 = -17.4558; c14 = -17.565; c15 = -28.0968; c16 = -1.9931.$

$d1 = -14.2933; d2 = -3.4226; d3 = 3.6801; d4 = -6.3084; d5 = 17.5501; d6 = 10.9404; d7 = 0.20722; d8 = -33.8737; d9 = -13.011; d10 = -12.272; d11 = -14.6543; d12 = 6.2884; d13 = -15.5691; d14 = -6.3556; d15 = -5.2115; d16 = -3.9357.$

et : $e = 1; f = -1; g = 19, 158; h = -1, 727; k = 1, 26622998714447;$
 $l = 0, 0729999989271164; m = -1; n = 408, 990; o = 290, 120; p = 1; v = -1.0666.$

F.2 Cartes de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ (μatm) produitesFIGURE F.1 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2002 et Mars 2003 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

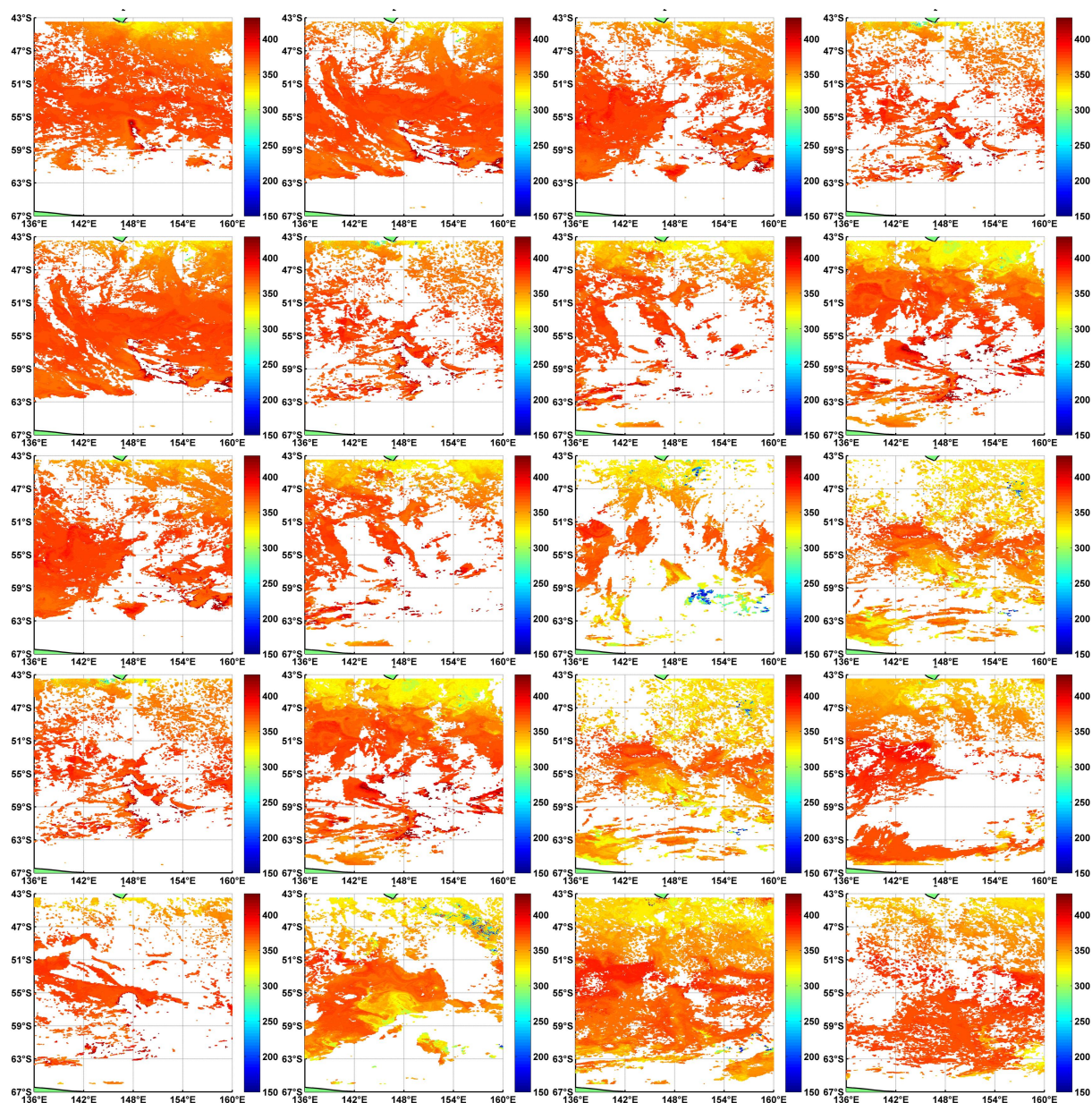


FIGURE F.2 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2003 et Mars 2004 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

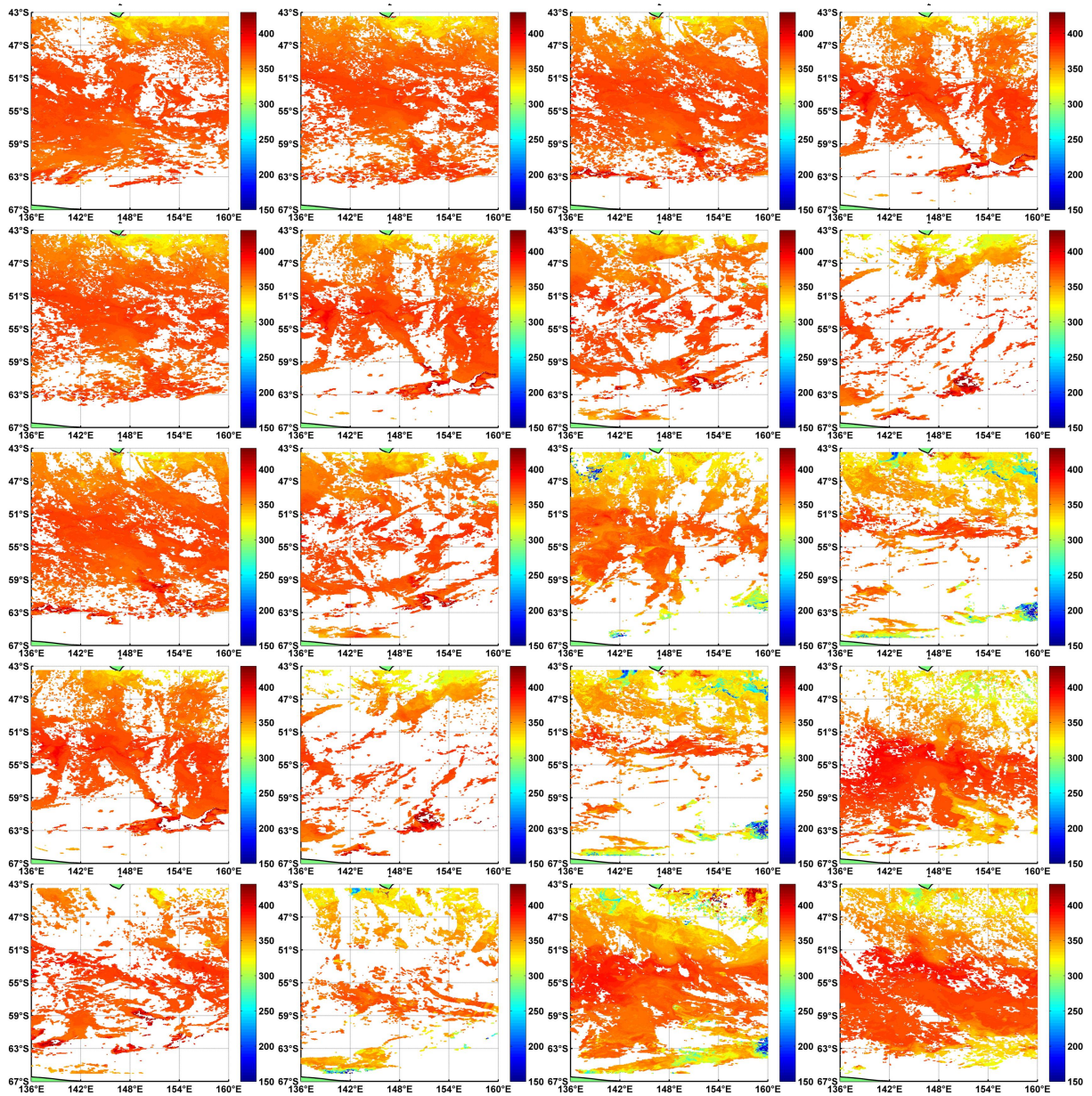


FIGURE F.3 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2004 et Mars 2005 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

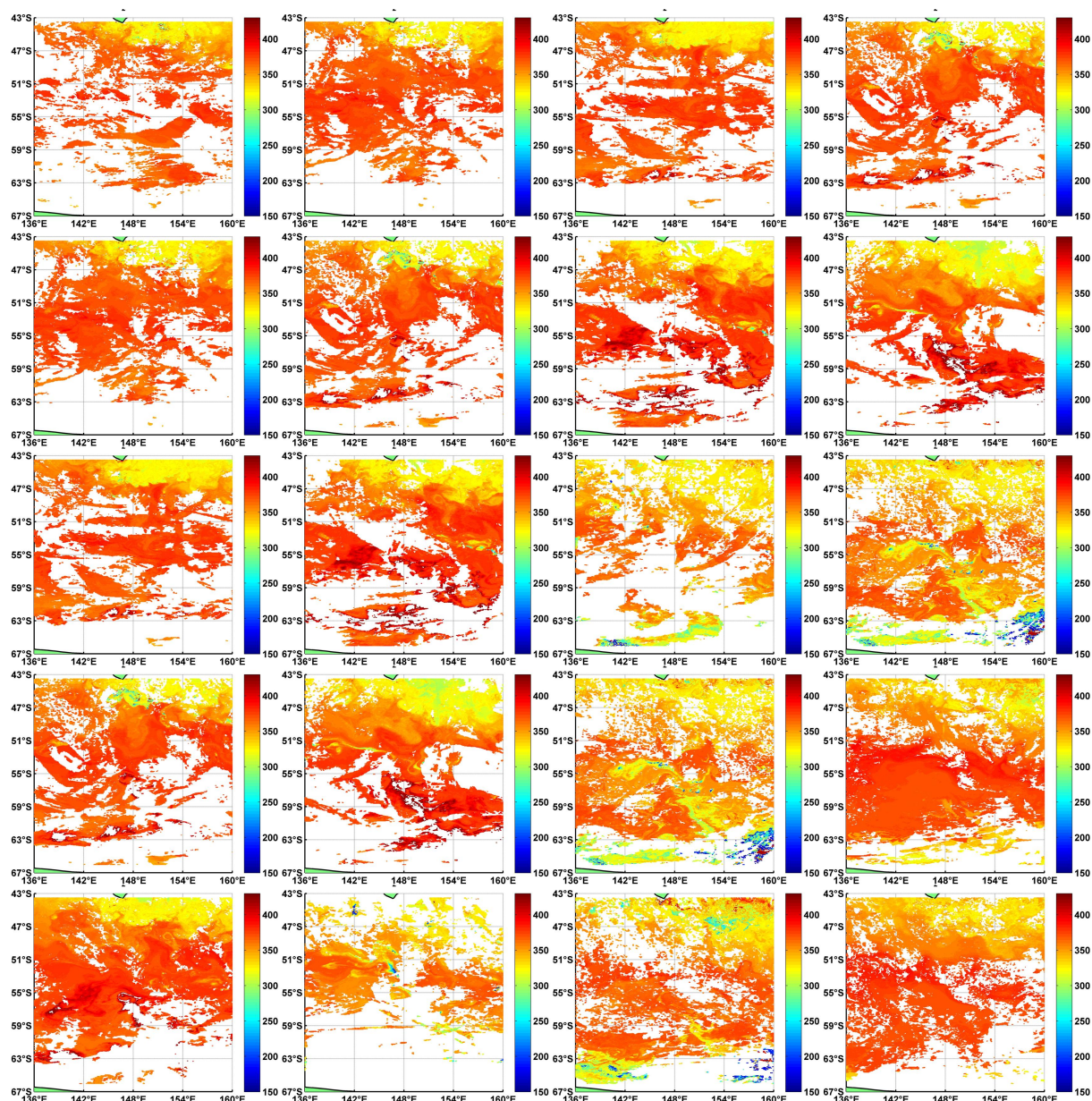


FIGURE F.4 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2005 et Mars 2006 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

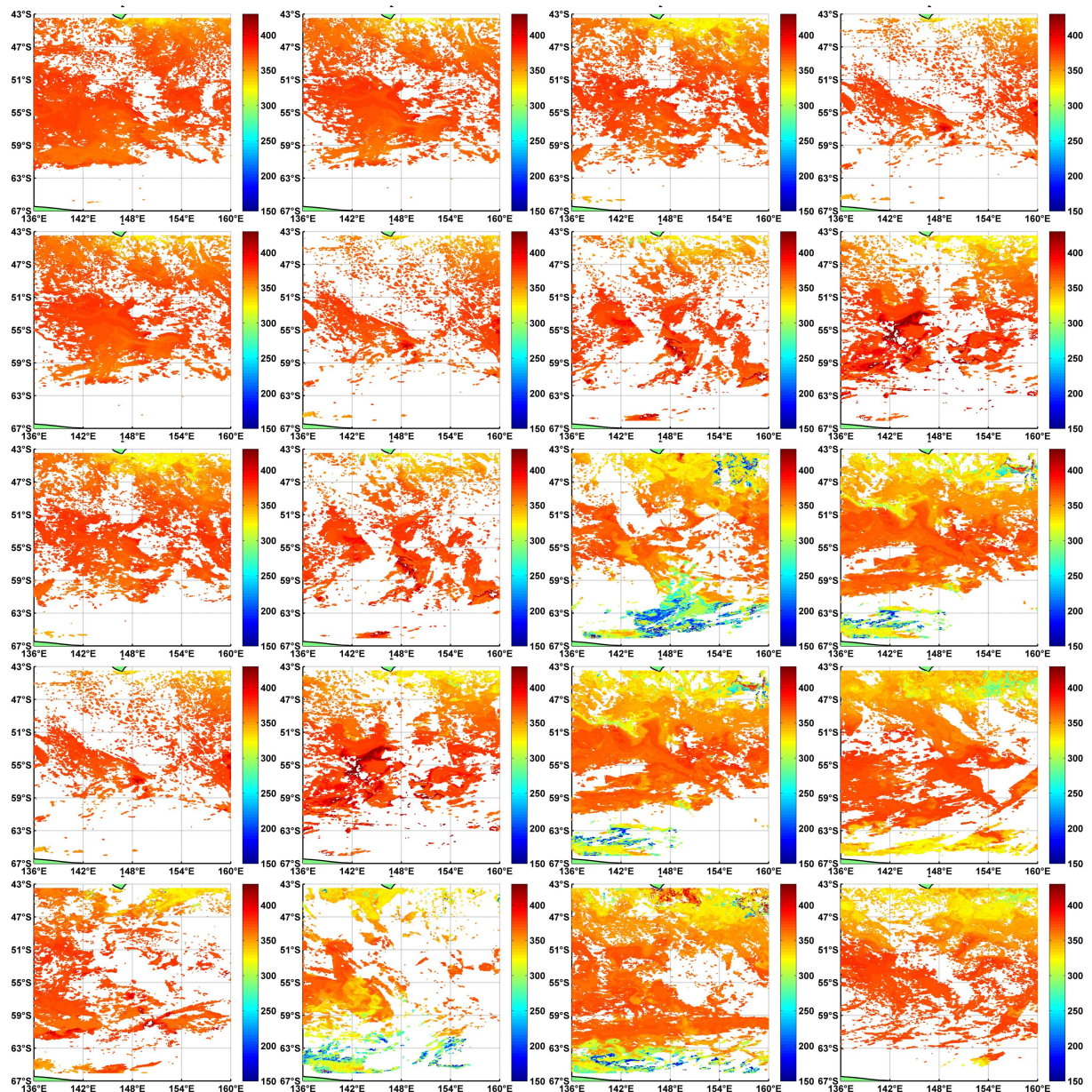


FIGURE F.5 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2006 et Mars 2007 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

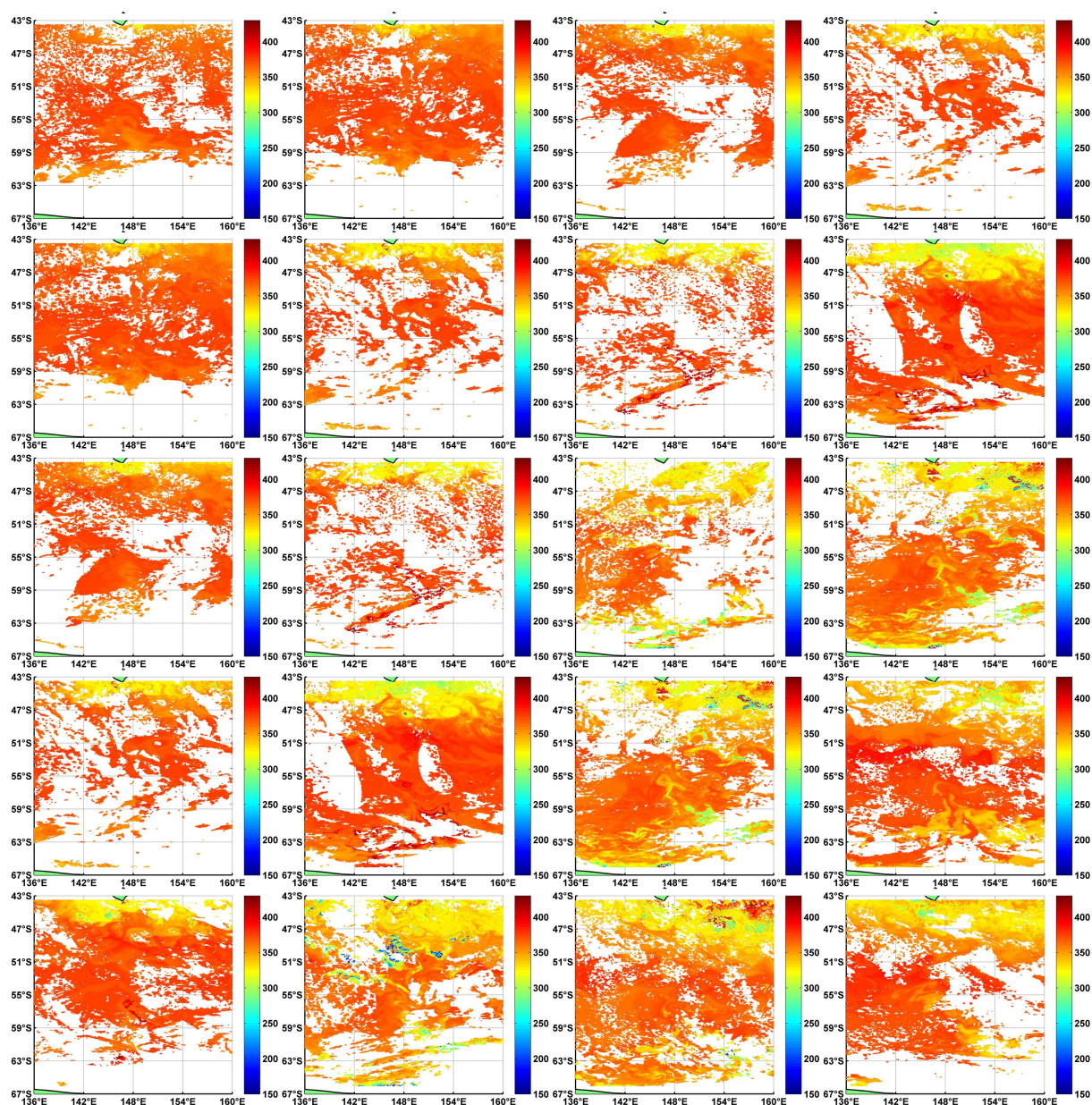


FIGURE F.6 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2007 et Mars 2008 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

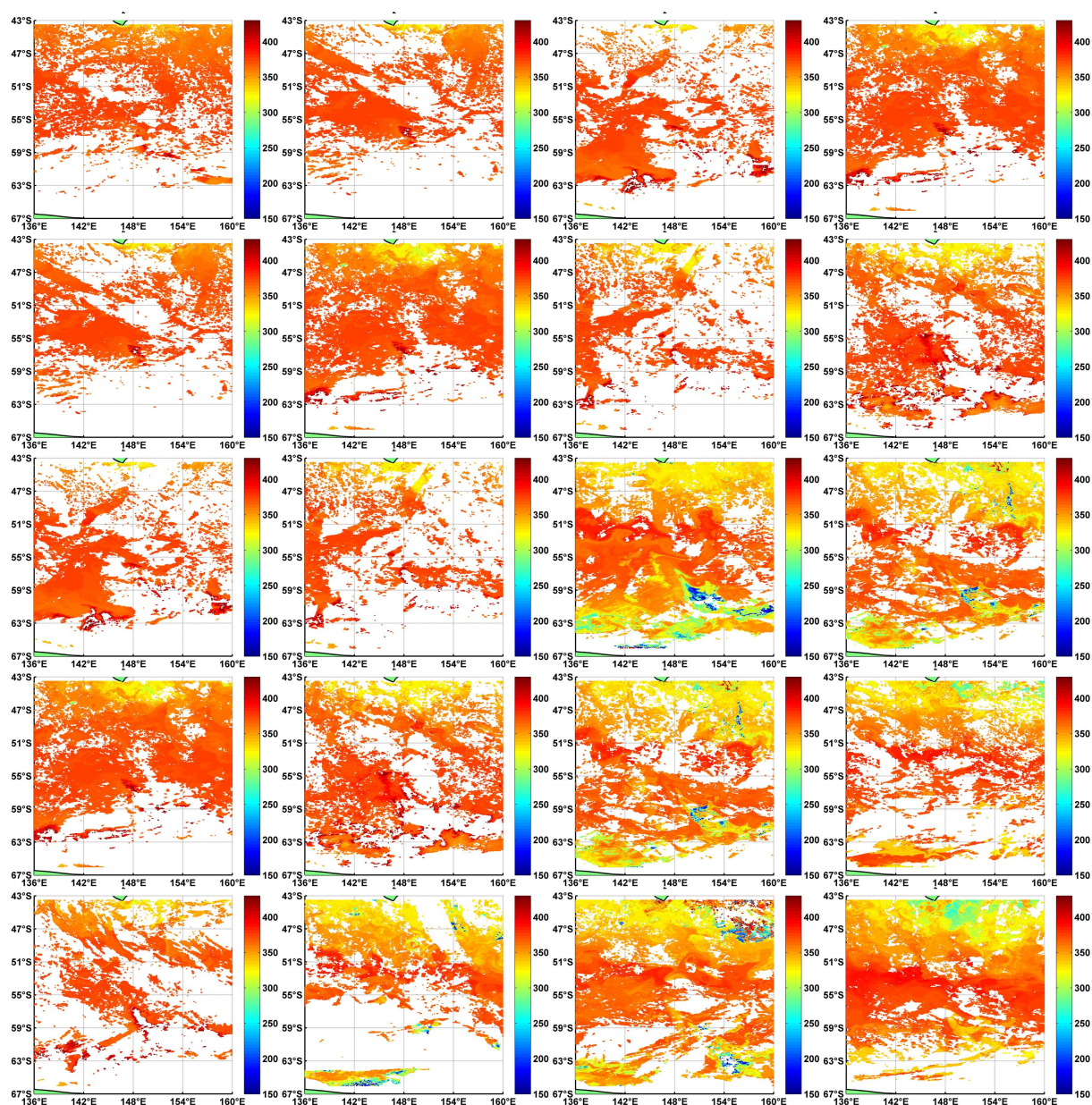


FIGURE F.7 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2008 et Mars 2009 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

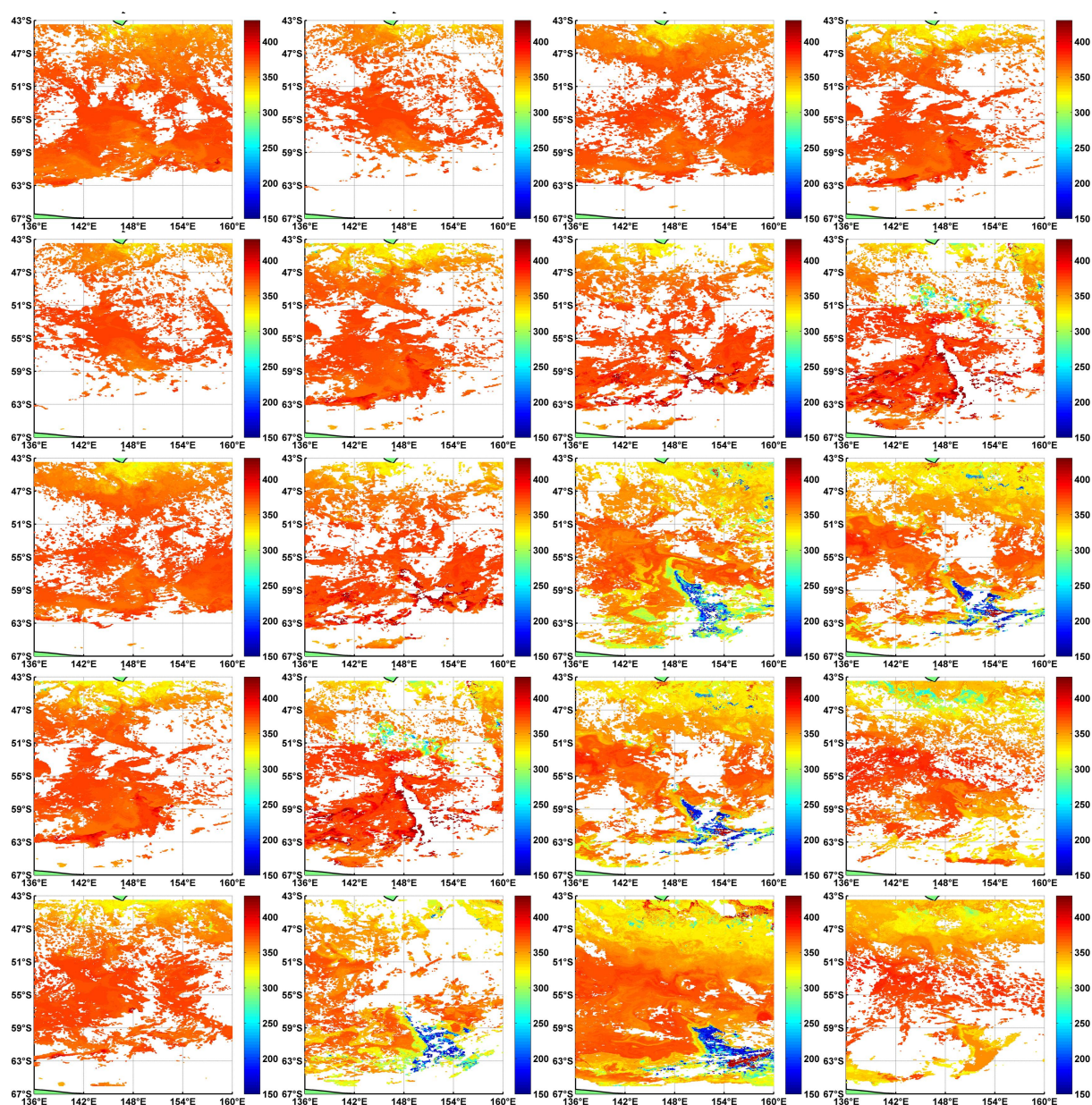


FIGURE F.8 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2009 et Mars 2010 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

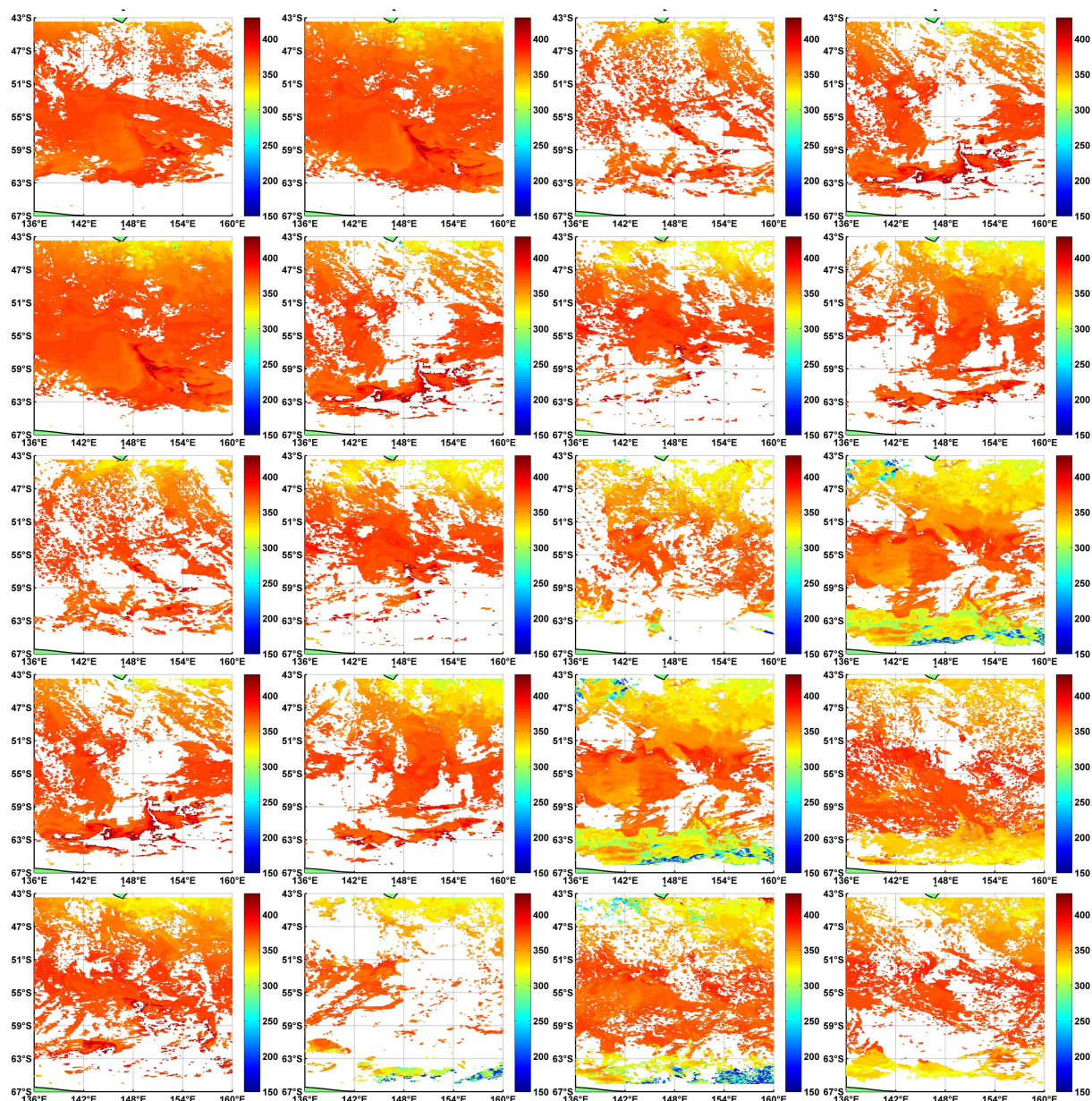


FIGURE F.9 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2010 et Mars 2011 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

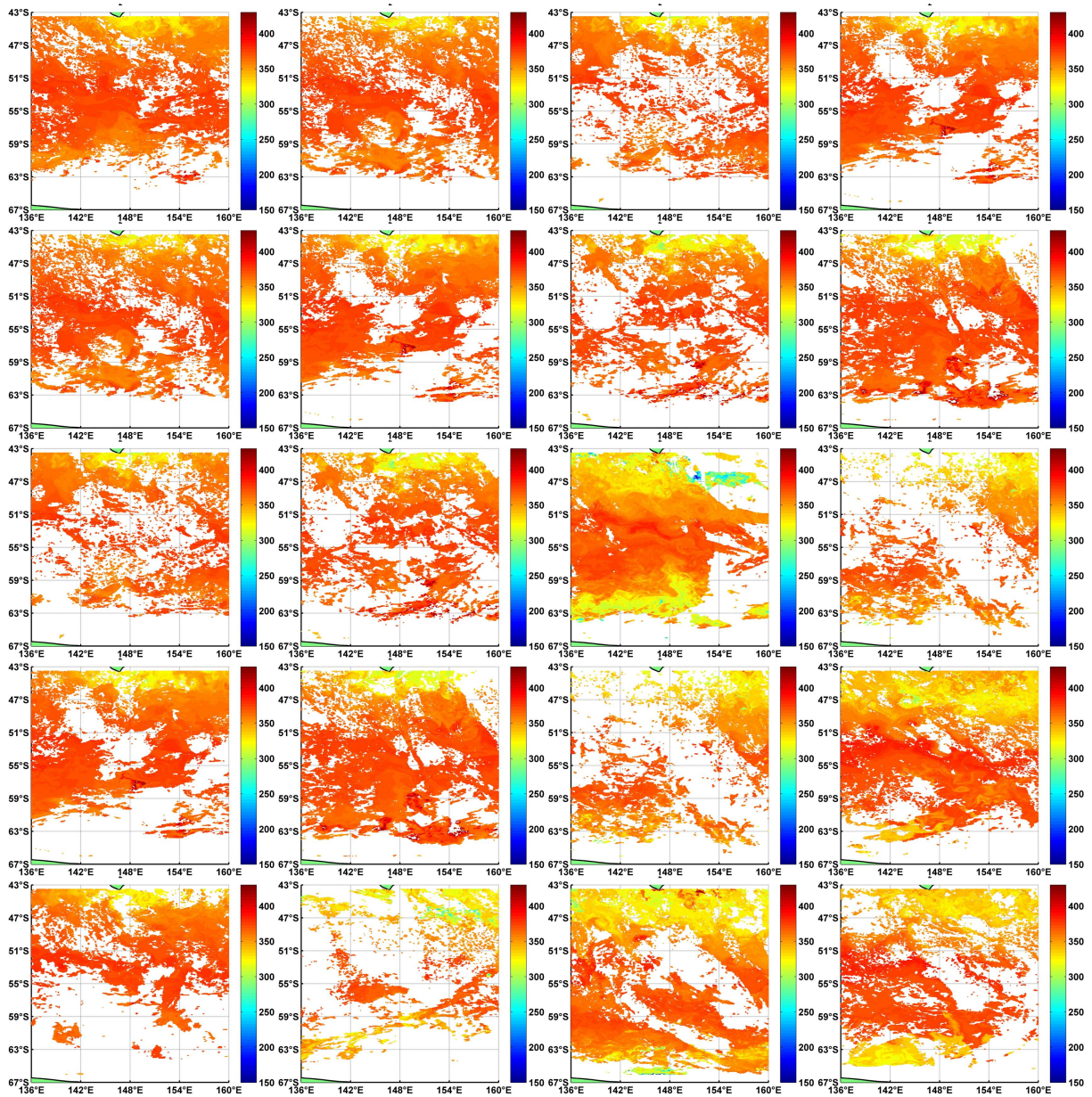


FIGURE F.10 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2011 et Mars 2012 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

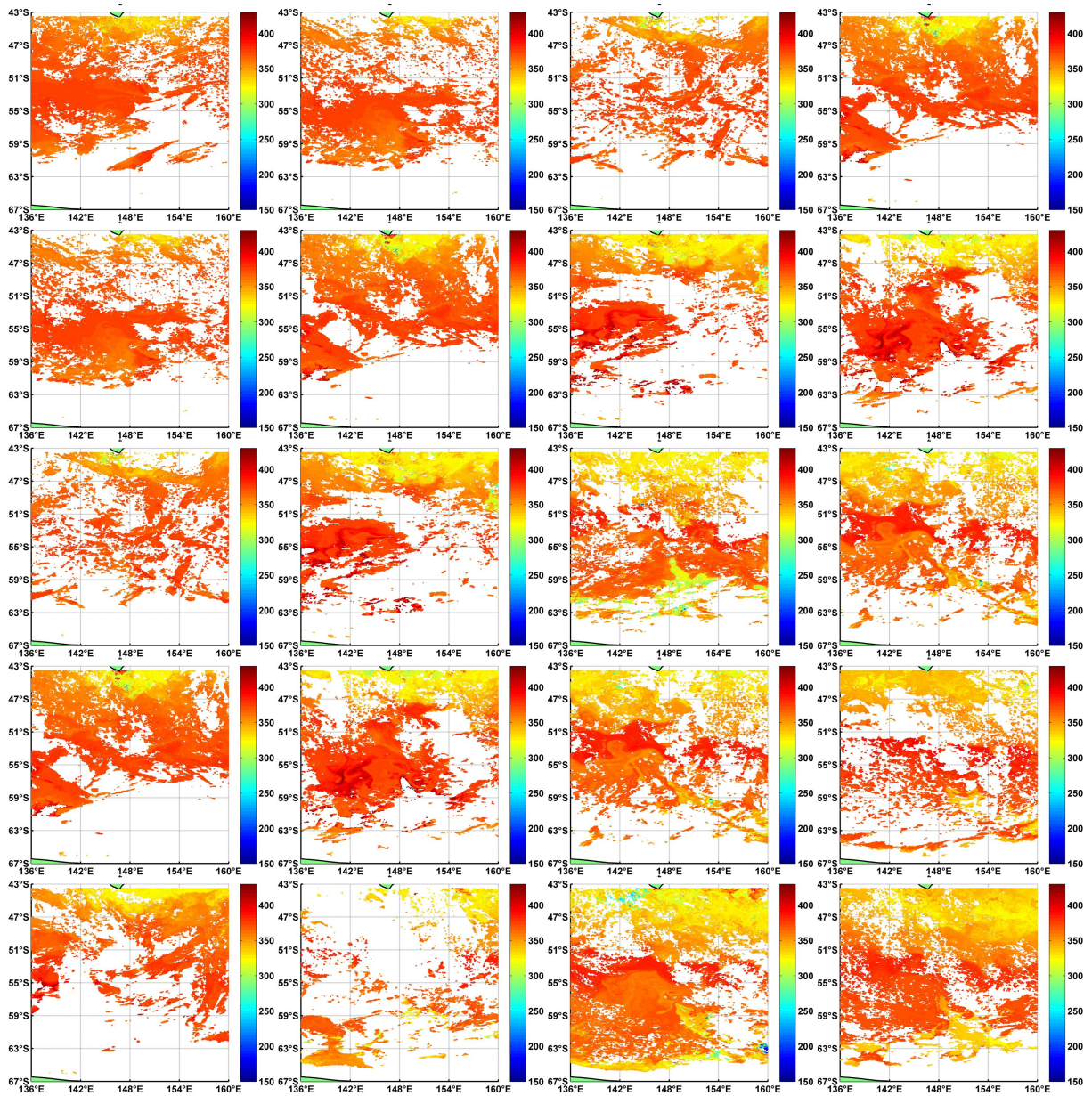


FIGURE F.11 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2012 et Mars 2013 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

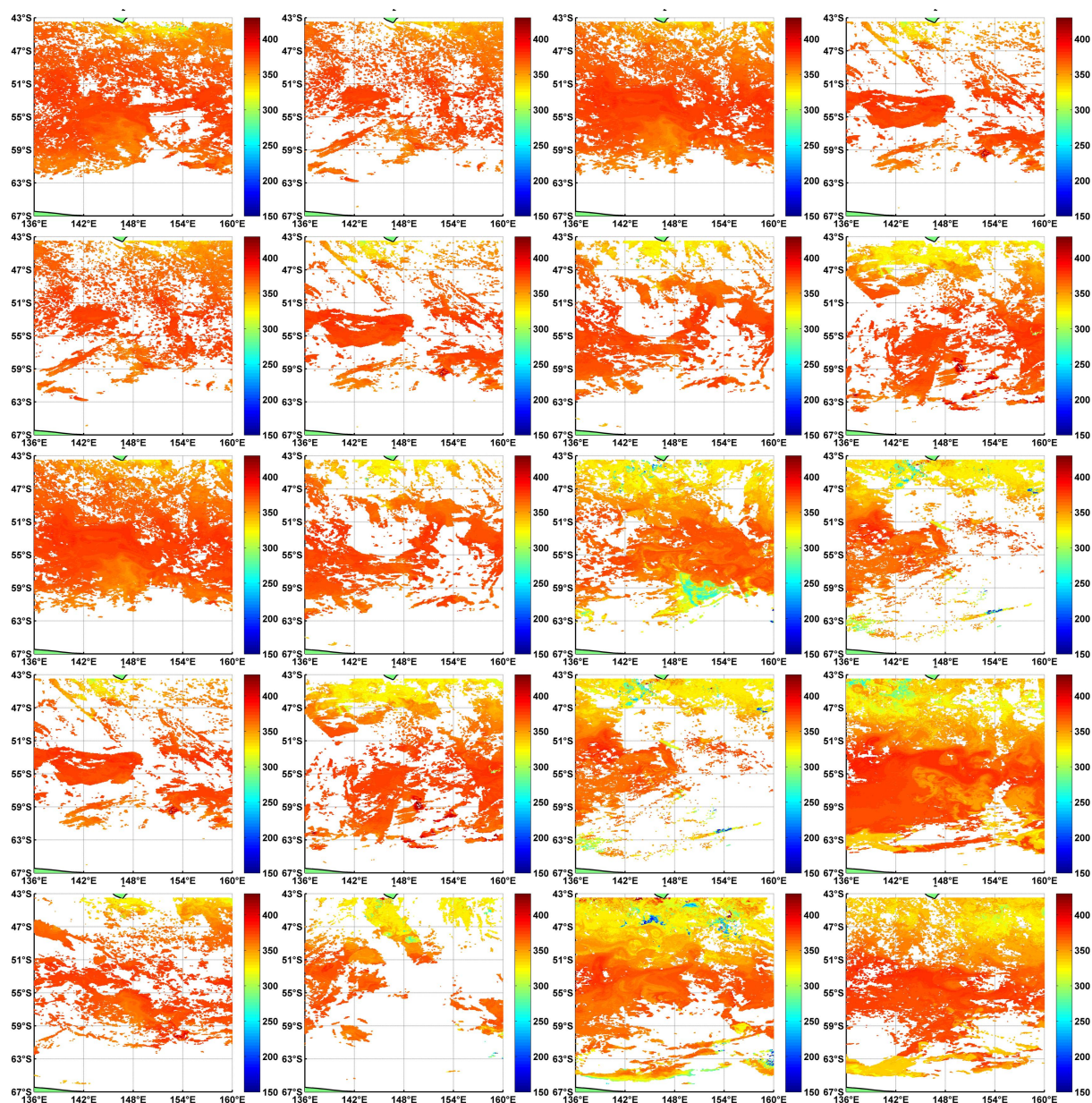


FIGURE F.12 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2013 et Mars 2014 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

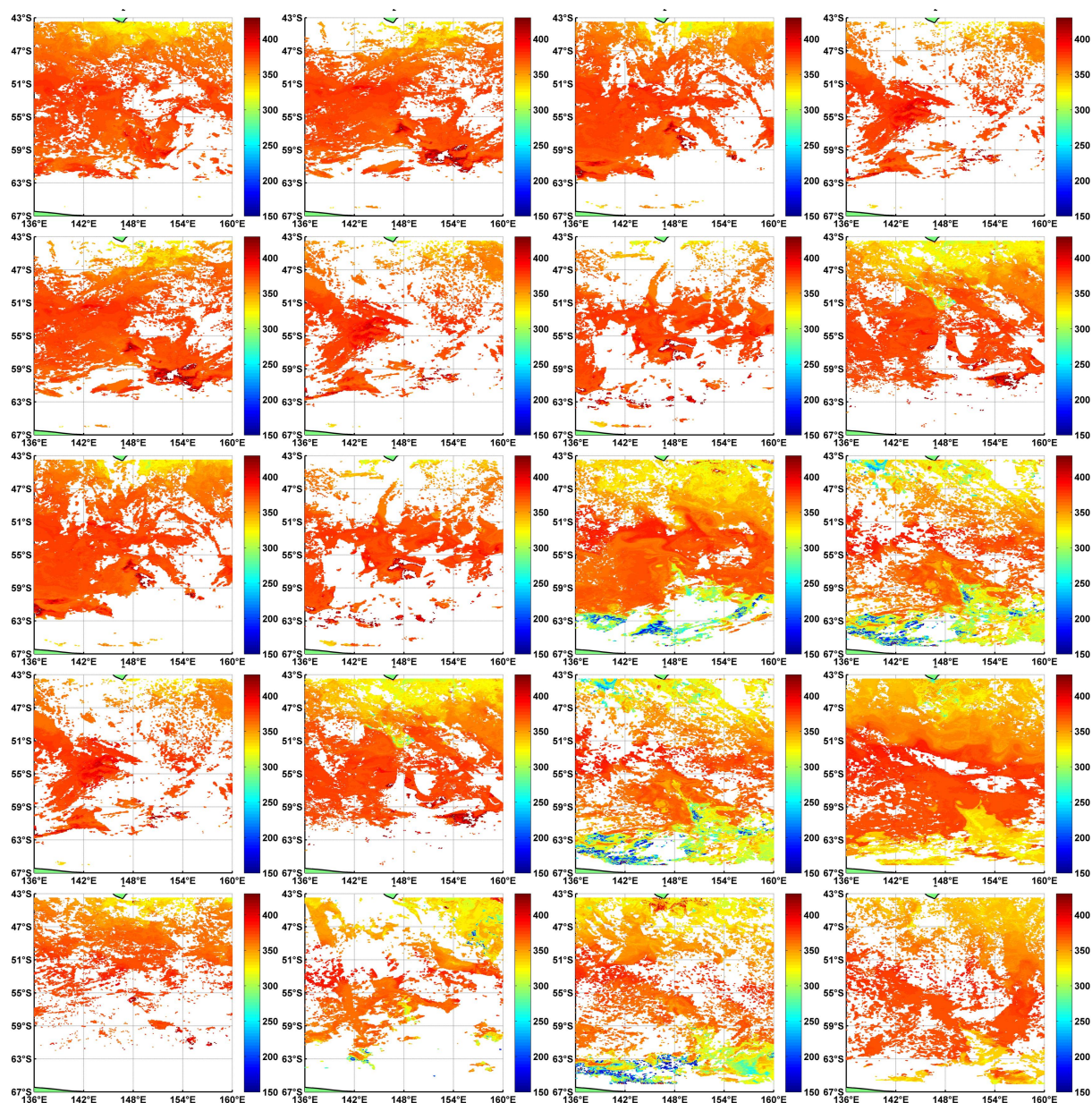


FIGURE F.13 – Evolution de la fugacité du CO₂ entre Octobre 2014 et Mars 2015 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

Annexe G

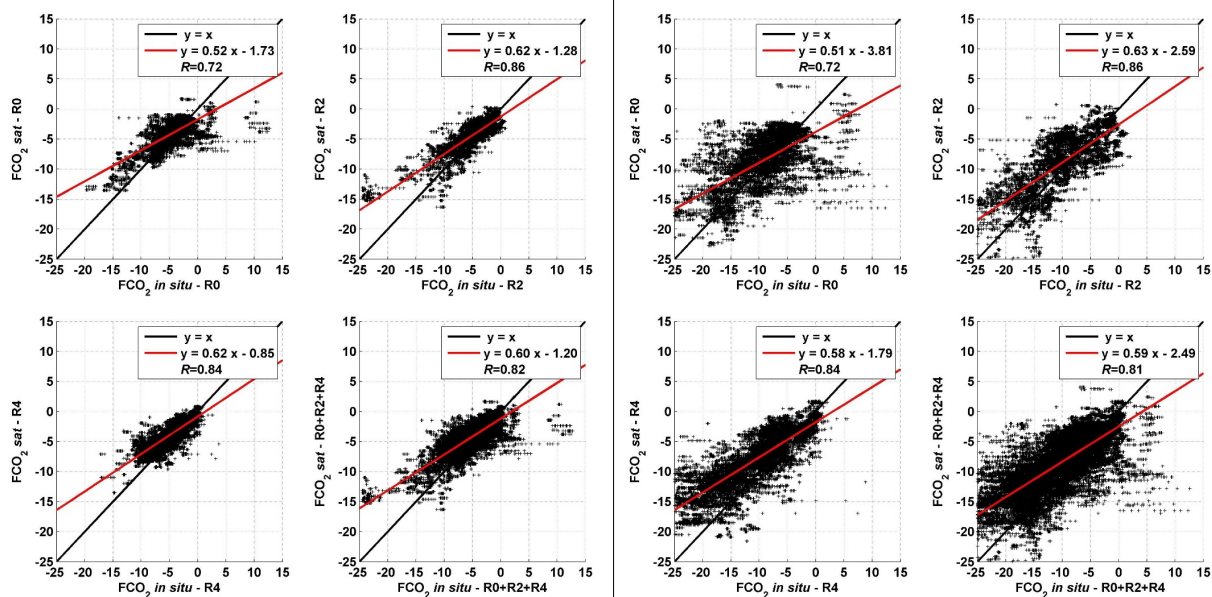
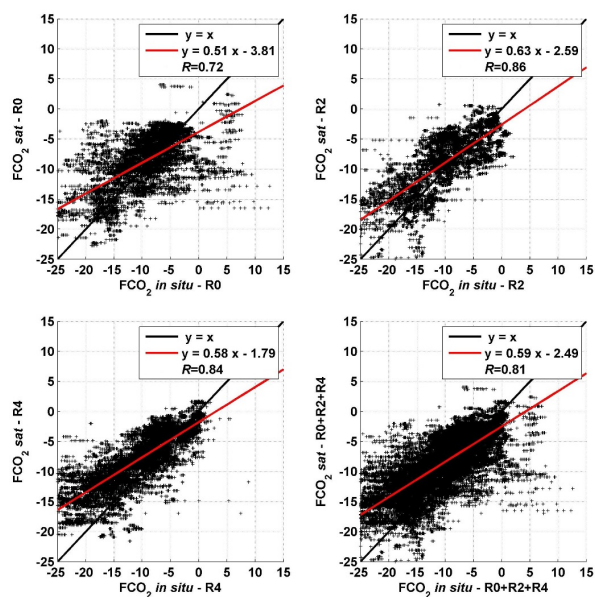
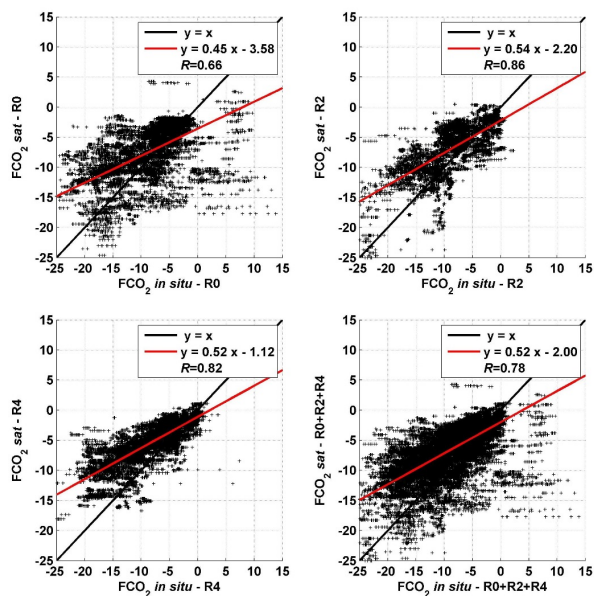
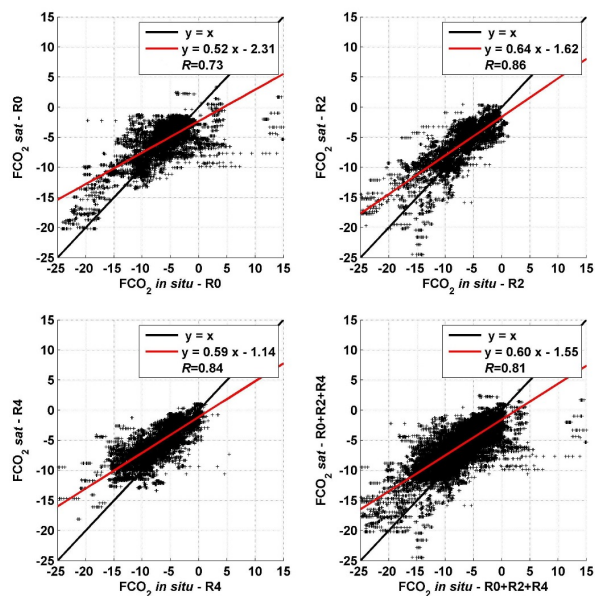
Calcul du Flux de CO₂ (FCO₂)

G.1 Résultats du Calcul du Flux pour toutes les références

Dans cette section, nous présentons les résultats du calcul du FCO₂ pour chaque référence du coefficient de transfert.

	Référence	R0		R2		R4		Glob.	Glob.
		RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>	RMSE	<i>R</i>
1	Liss and Merlivat (1986)	2.19	0.72	2.18	0.86	1.74	0.84	2.00	0.82
2	Wanninkhof (1992)	5.22	0.72	5.07	0.86	4.25	0.84	4.76	0.81
3	Wanninkhof and McGillis (1999)	5.88	0.66	5.80	0.86	3.93	0.82	5.07	0.78
4	Nightingale et al. (2000)	3.11	0.73	3.03	0.86	2.56	0.84	2.85	0.81
5	Jean-Baptiste et al. (2002)	3.44	0.75	3.38	0.85	3.02	0.84	3.24	0.82
6	Ho et al. (2006)	3.39	0.72	3.30	0.86	2.76	0.84	3.10	0.81
7	Sweeney et al. (2007)	3.61	0.72	3.51	0.86	2.94	0.84	3.30	0.81
8	Wanninkhof et al. (2009)	4.17	0.66	4.15	0.82	2.97	0.81	3.67	0.77
9	Ho et al. (2011) (a)	3.65	0.72	3.55	0.86	2.97	0.84	3.33	0.81
10	Ho et al. (2011) (b)	5.90	0.66	5.82	0.86	3.94	0.82	5.09	0.78
11	Wanninkhof (2014)	3.36	0.72	3.27	0.86	2.73	0.84	3.07	0.81

TABLEAU G.1 – Résultats du calcul du Flux pour toutes les équations. Le RMSE (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) est calculé suivant la différence entre le calcul du FCO₂ avec les données *in situ* et *sat*, le *R*² est le coefficient de détermination de la régression entre le FCO₂ calculé avec les données *in situ* et *sat*, Glob. : Global.

G.2 Régression du FCO₂ (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) *in situ* et *sat*FIGURE G.1 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Liss et Merlivat (1986).FIGURE G.2 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Wanninkhof (1992).FIGURE G.3 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Wanninkhof et McGillis (1999).FIGURE G.4 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Nightingale et al. (2000).

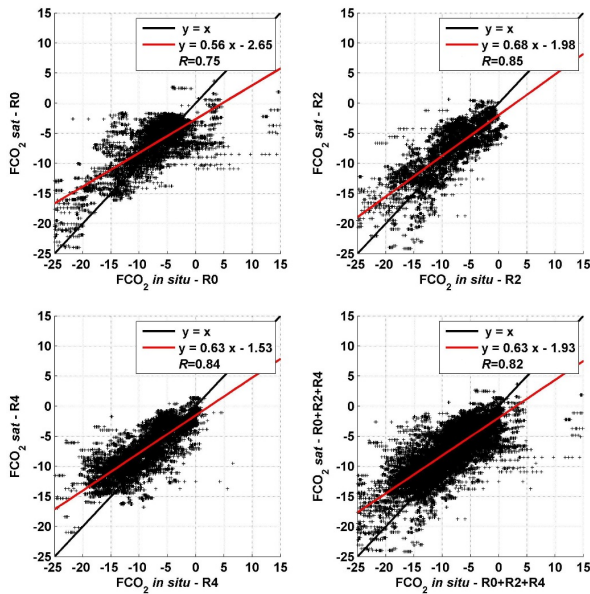


FIGURE G.5 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Jean-Baptiste *et al.* (2002).

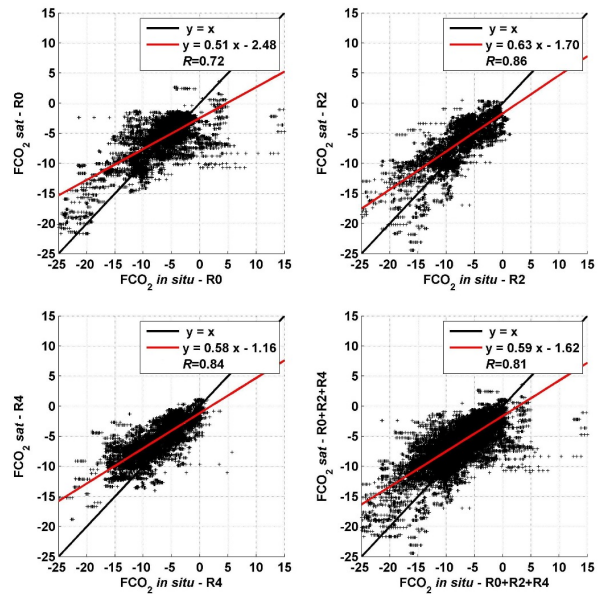


FIGURE G.6 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Ho *et al.* (2006).

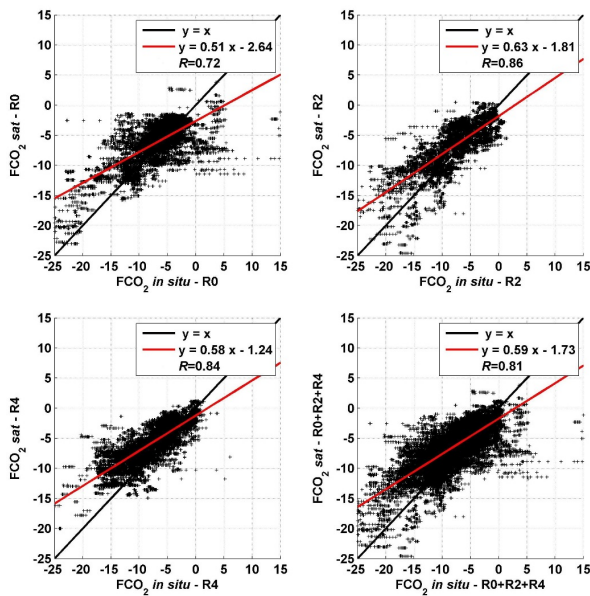


FIGURE G.7 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Sweeney *et al.* (2007).

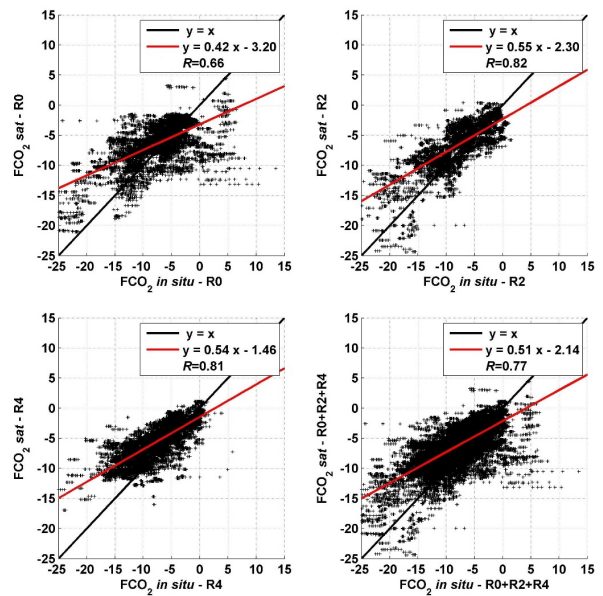


FIGURE G.8 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Wanninkhof *et al.* (2009).

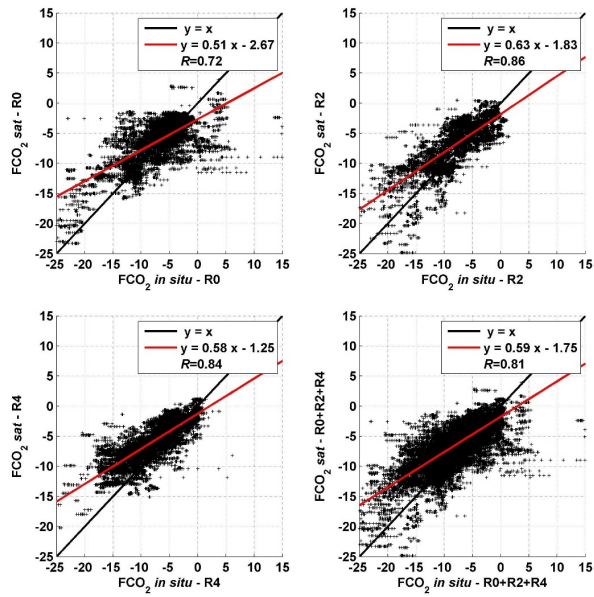


FIGURE G.9 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Ho *et al.* (2011) (équation (a)).

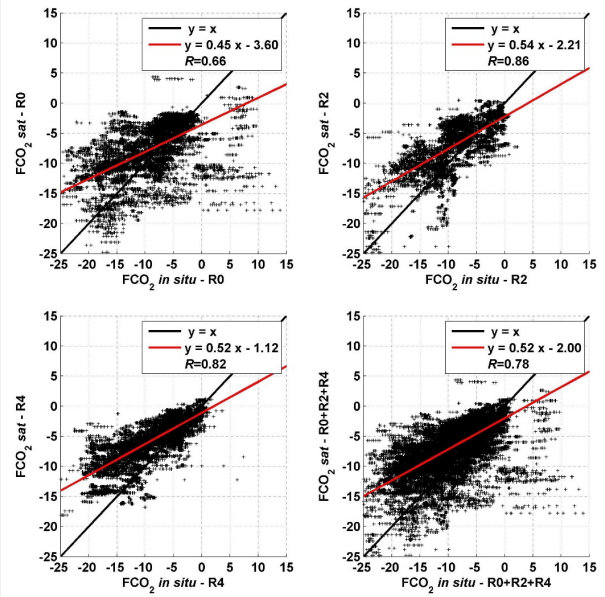
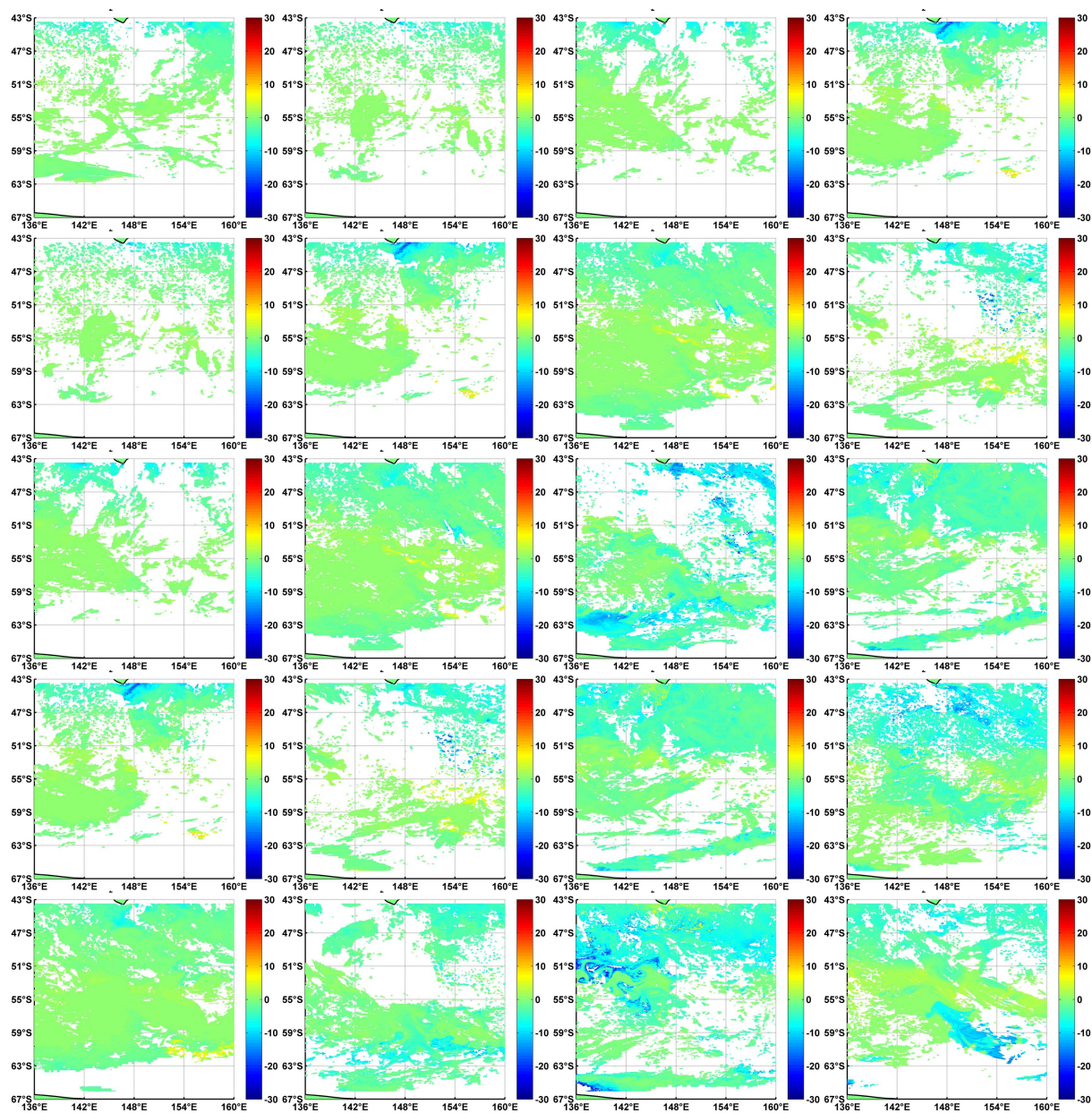


FIGURE G.10 – Regression entre les deux calculs du FCO₂ (*in situ* et *sat*) pour l'équation de Ho *et al.* (2011) (équation (b)).

G.3 Cartes du flux de CO₂ (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) produitesFIGURE G.11 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2002 et Mars 2003 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

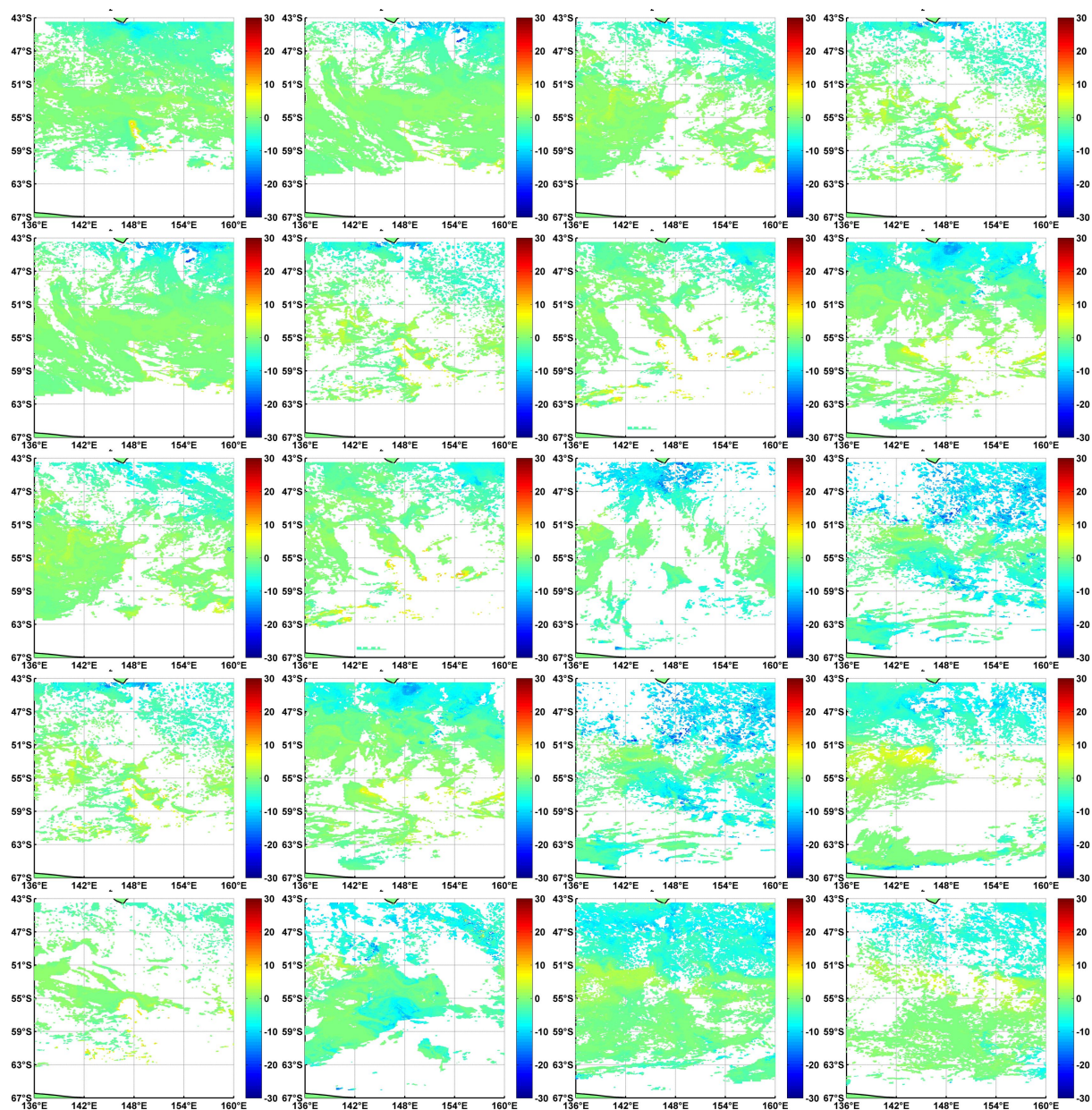


FIGURE G.12 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2003 et Mars 2004 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

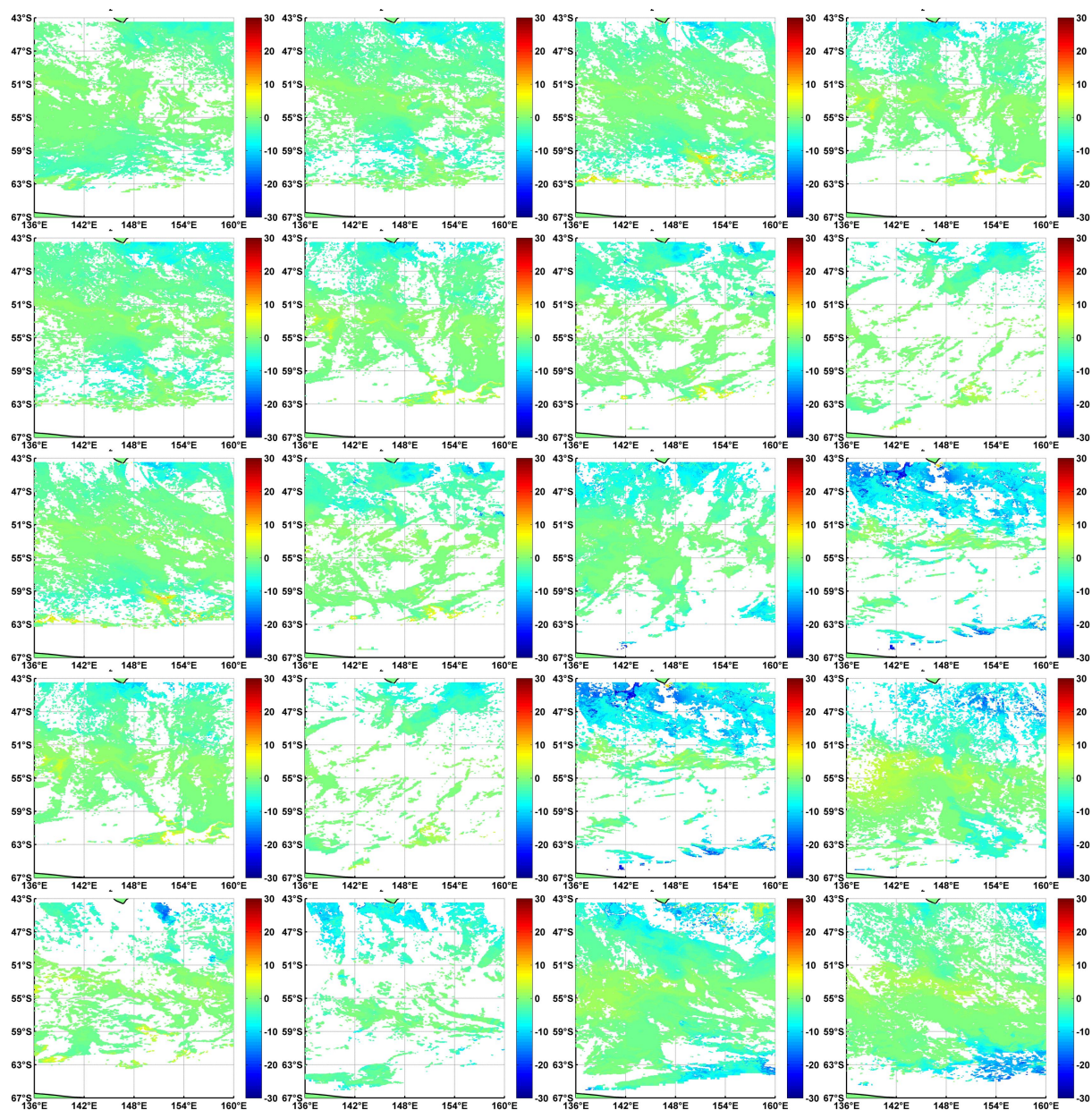


FIGURE G.13 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2004 et Mars 2005 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

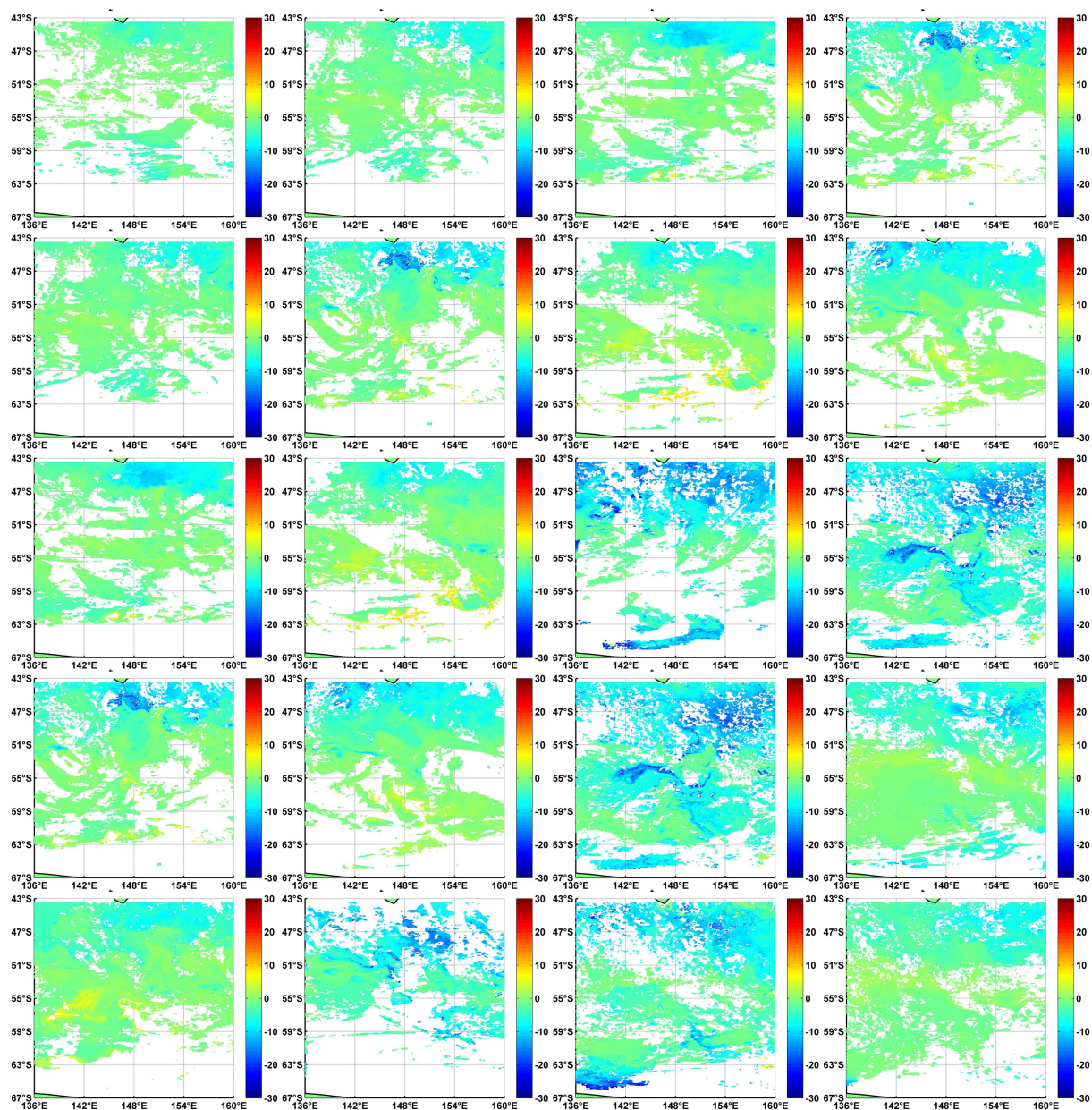


FIGURE G.14 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2005 et Mars 2006 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

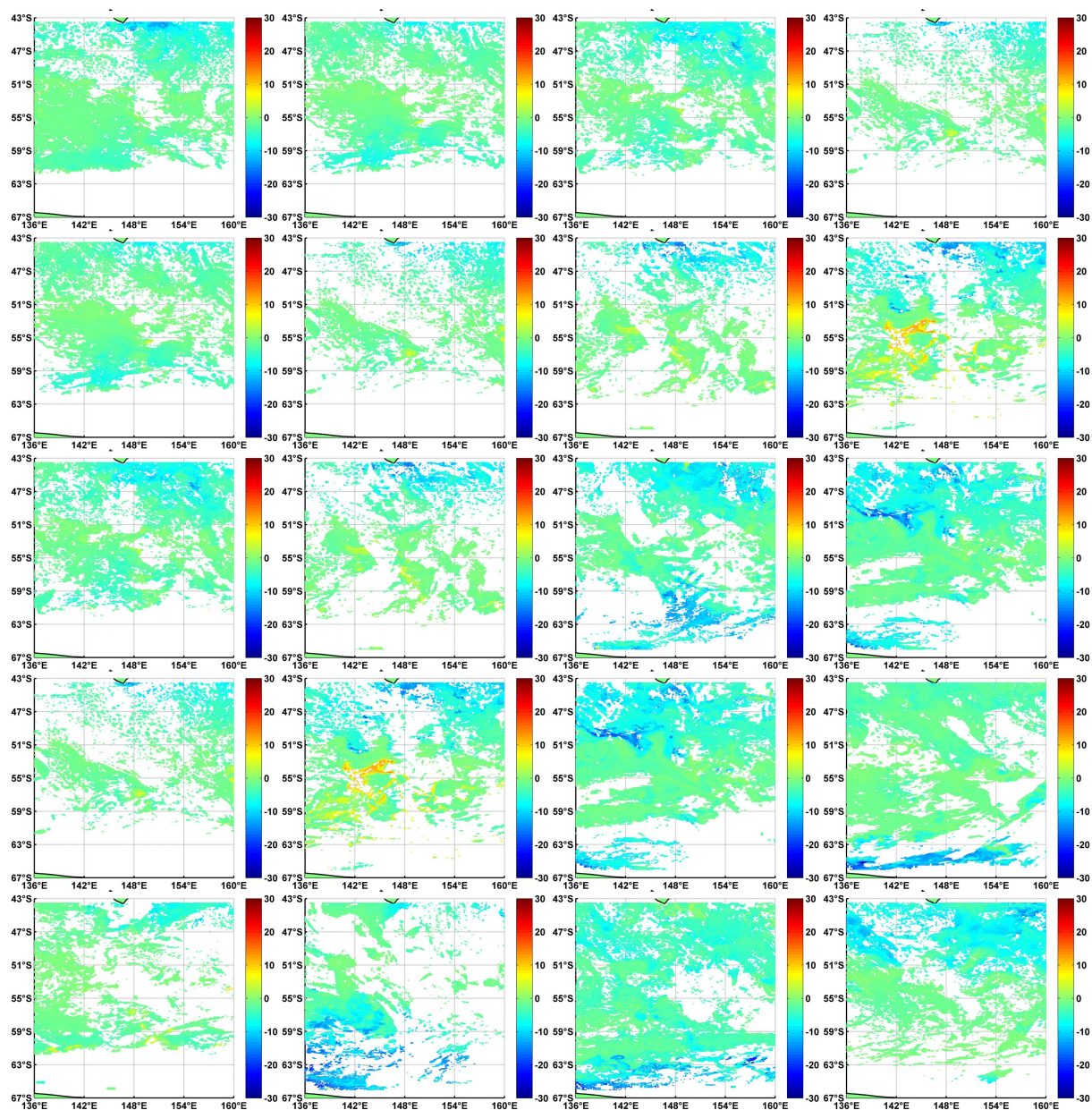


FIGURE G.15 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2006 et Mars 2007 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

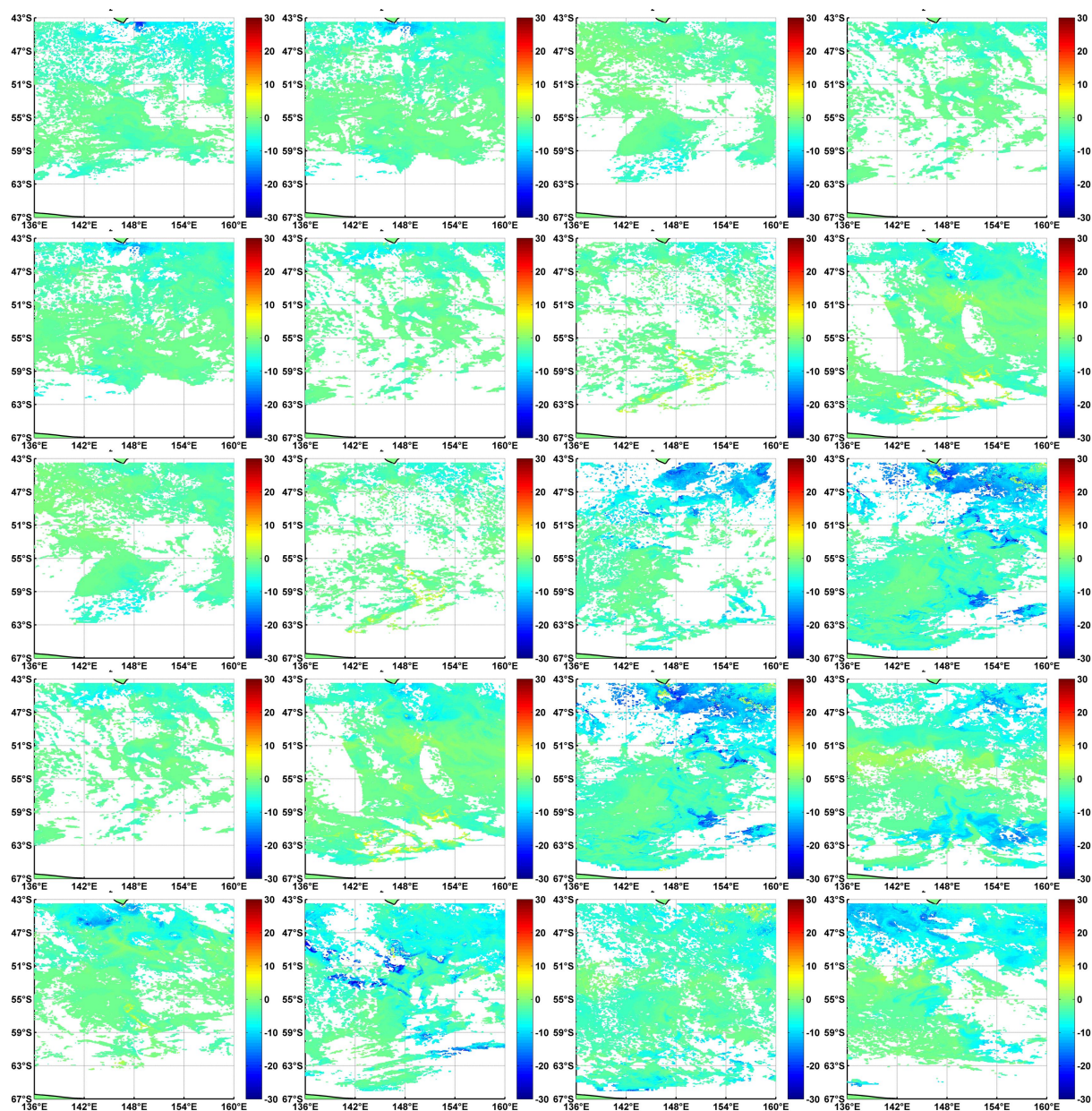


FIGURE G.16 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2007 et Mars 2008 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

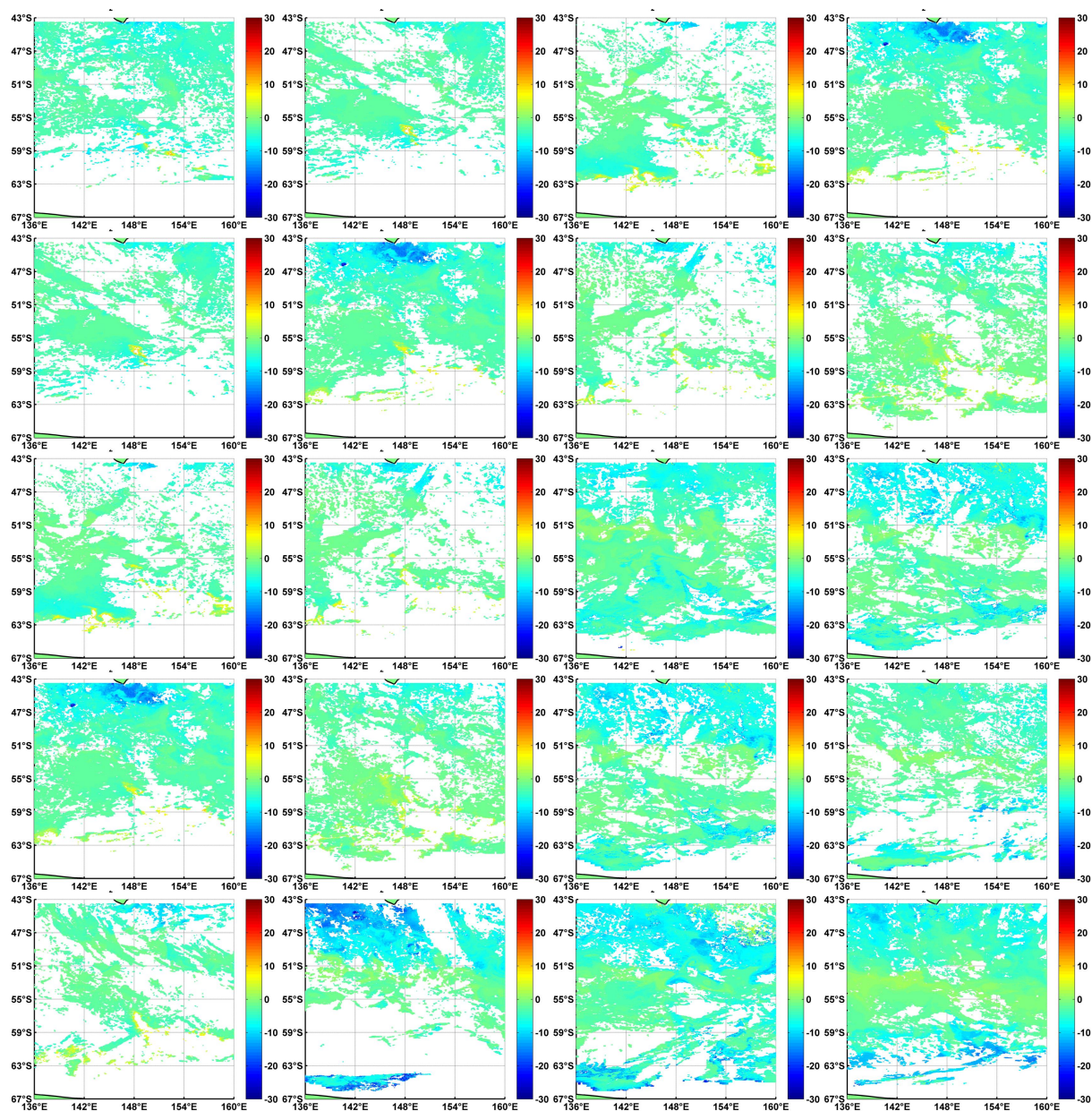


FIGURE G.17 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2008 et Mars 2009 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

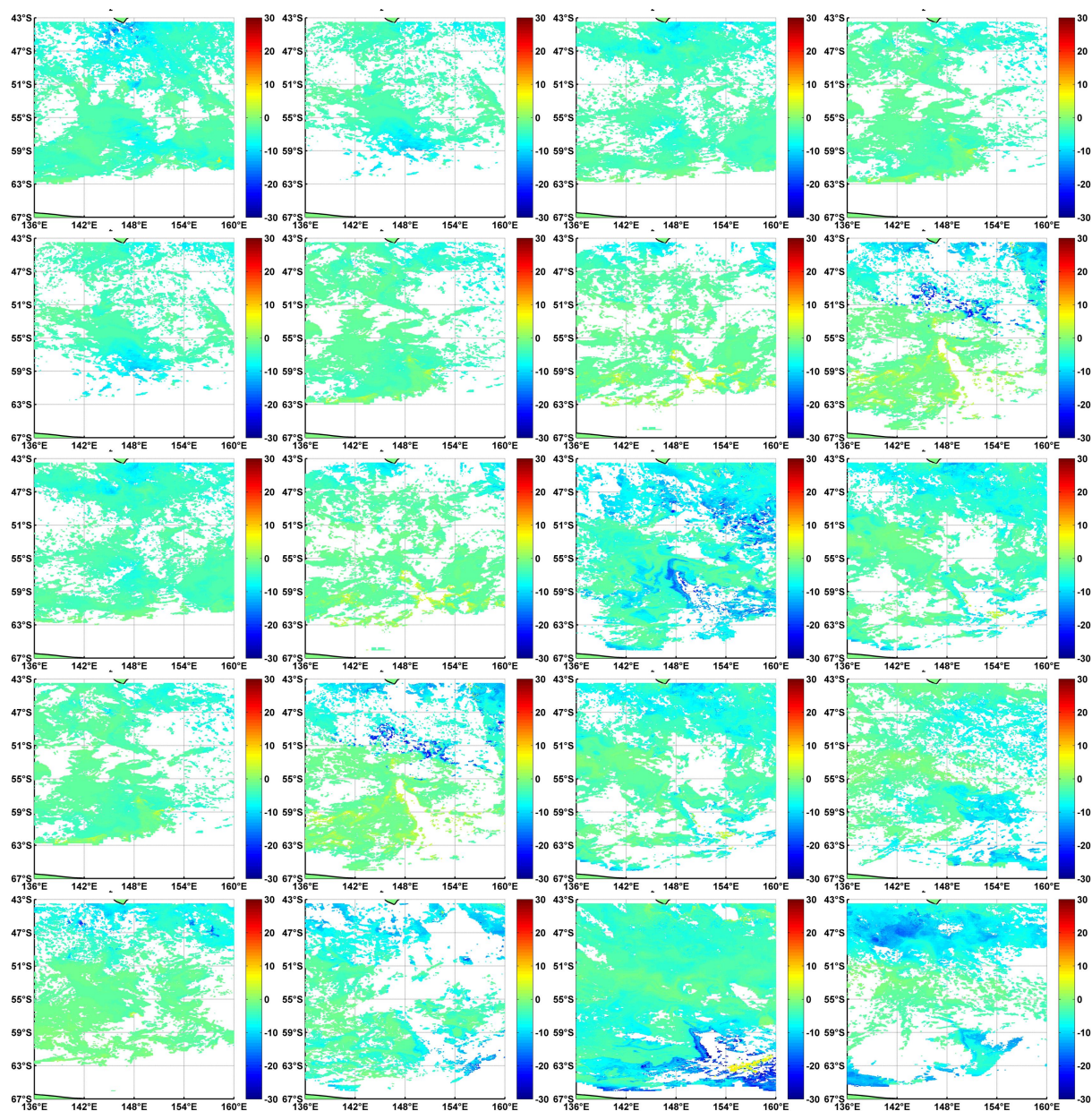


FIGURE G.18 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2009 et Mars 2010 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

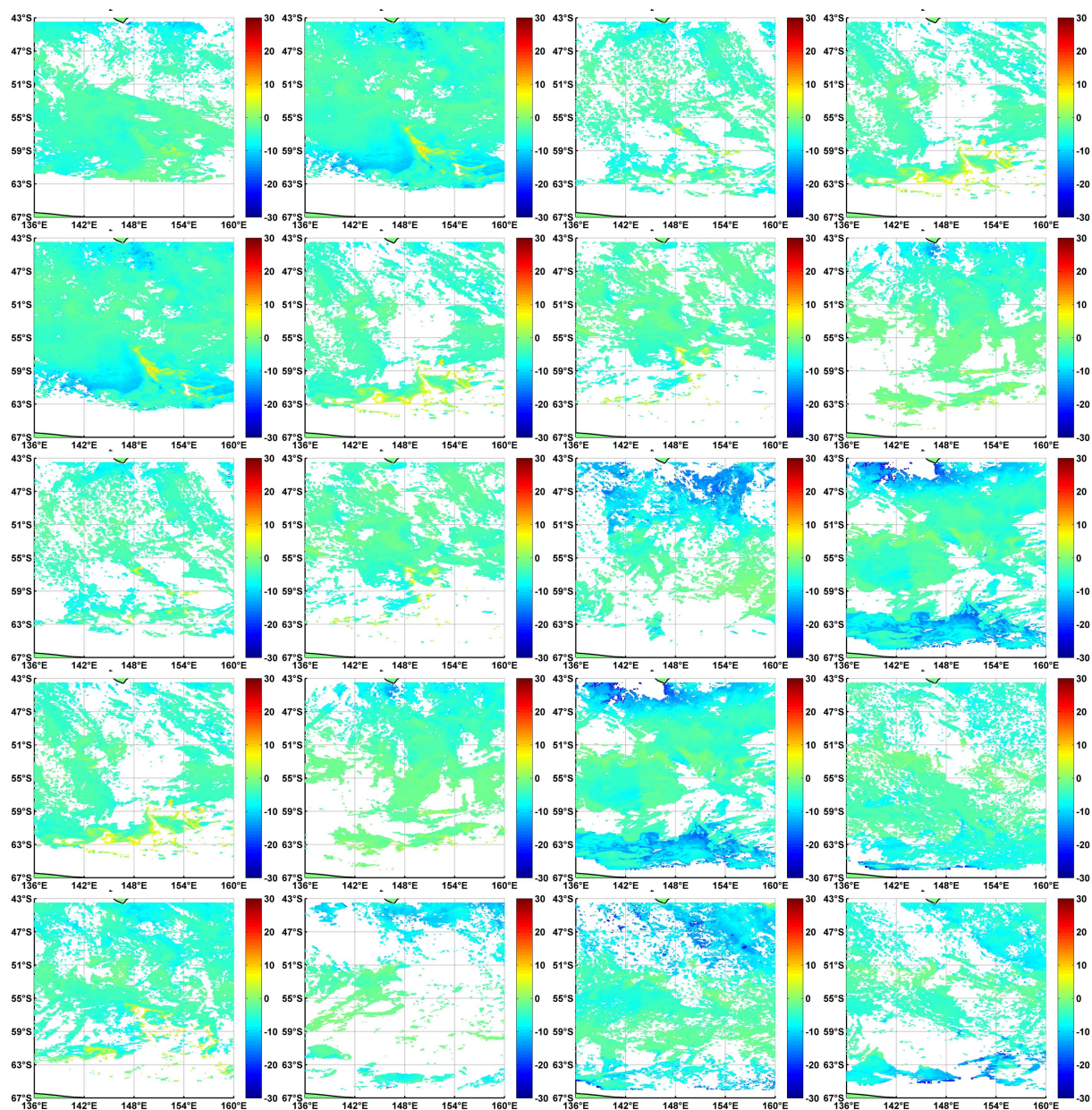


FIGURE G.19 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2010 et Mars 2011 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

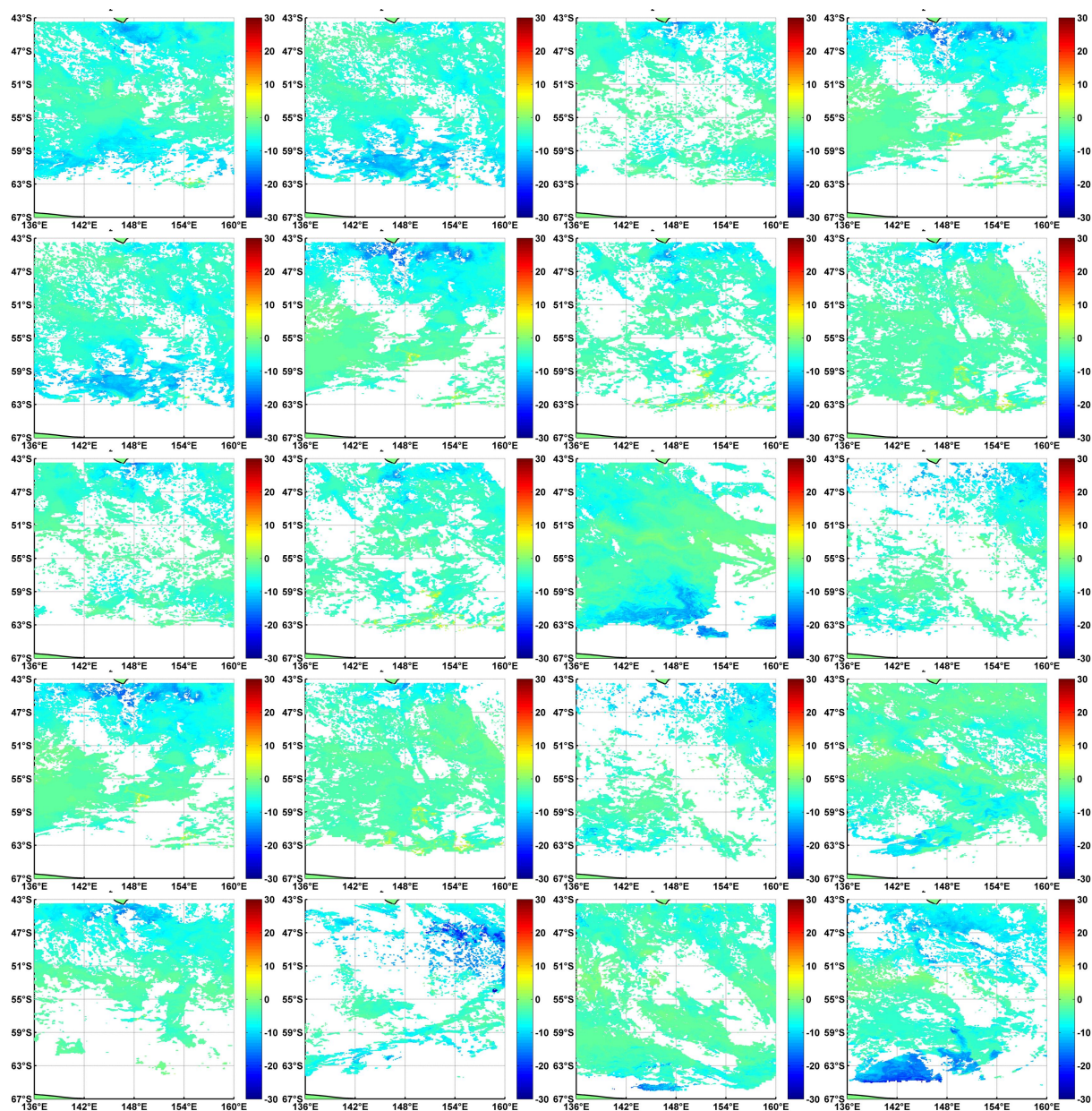


FIGURE G.20 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2011 et Mars 2012 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

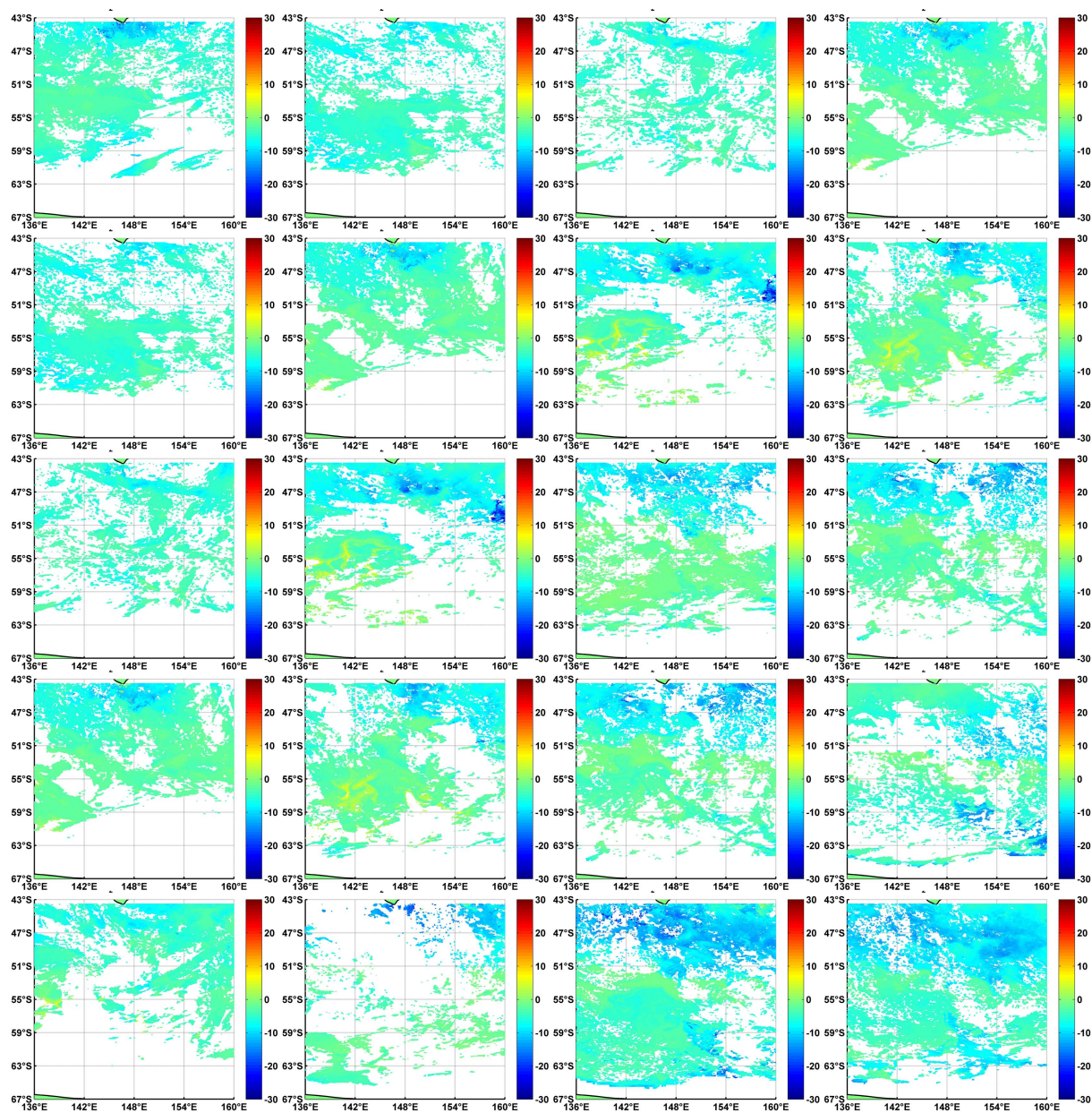


FIGURE G.21 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2012 et Mars 2013 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

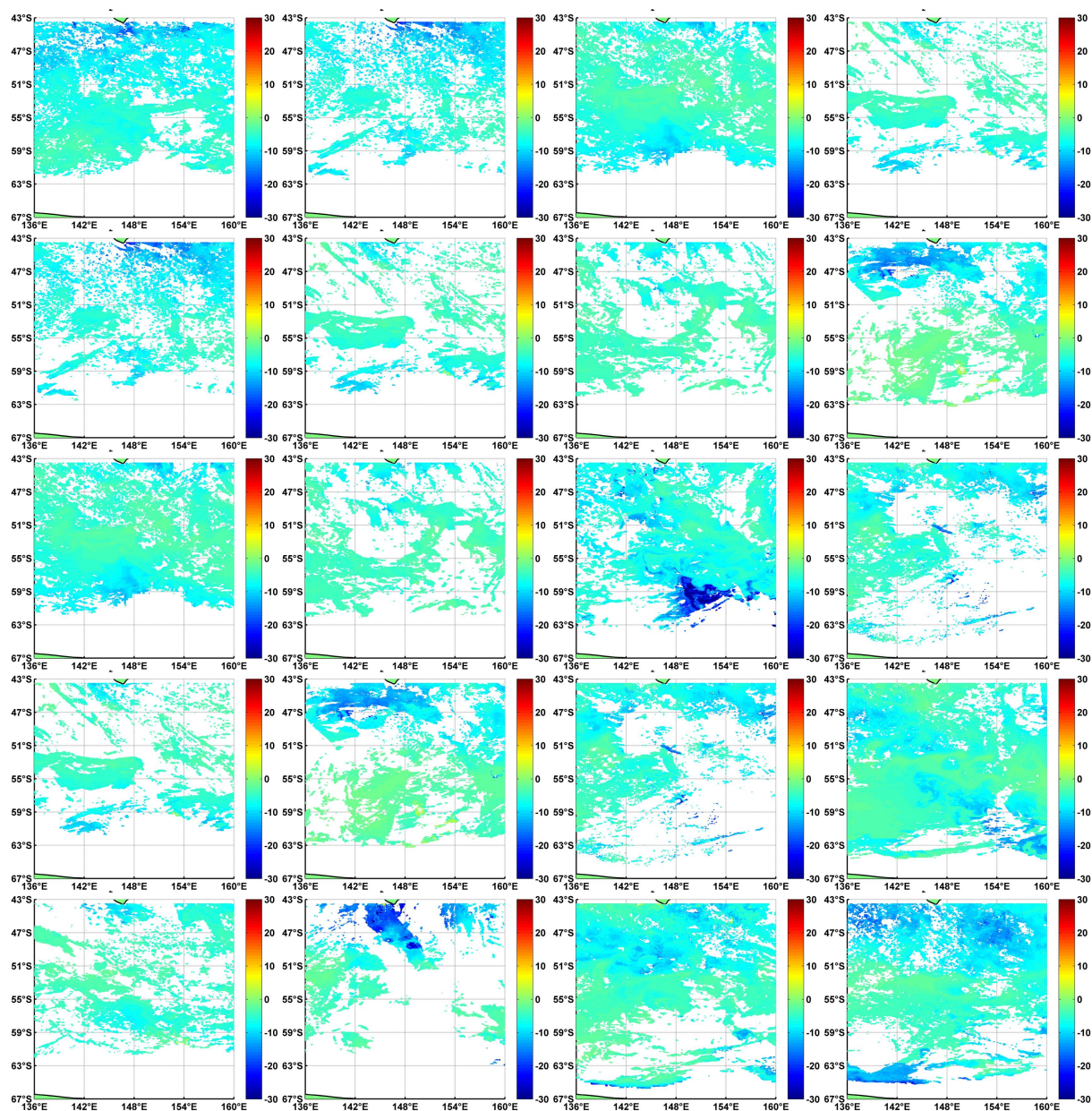


FIGURE G.22 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2013 et Mars 2014 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

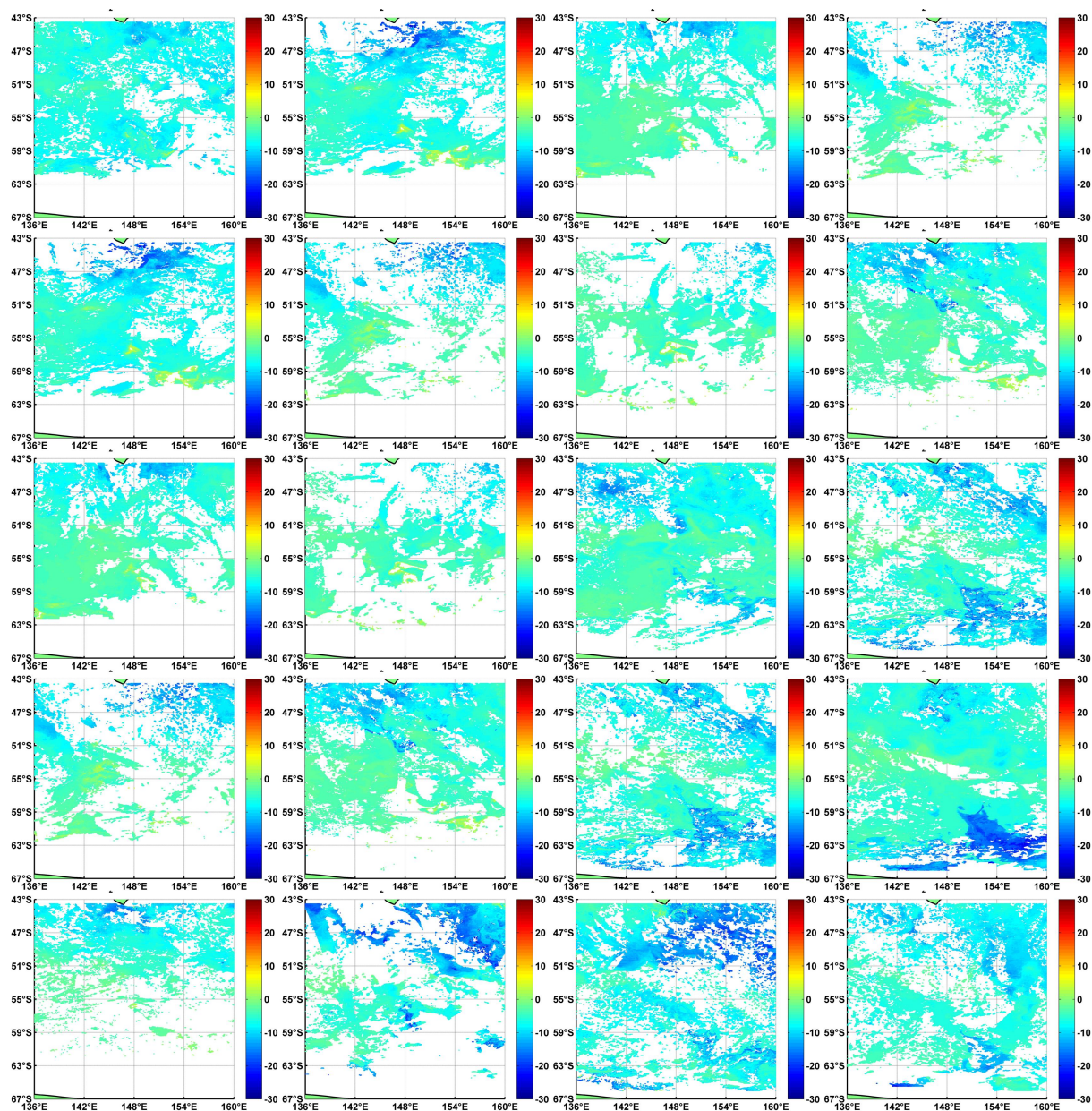


FIGURE G.23 – Evolution du flux de CO₂ entre Octobre 2014 et Mars 2015 (Par tranche de 8 jours, la première en haut à gauche et la dernière en bas à droite).

G.4 Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO₂ (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) suivant toutes les équations

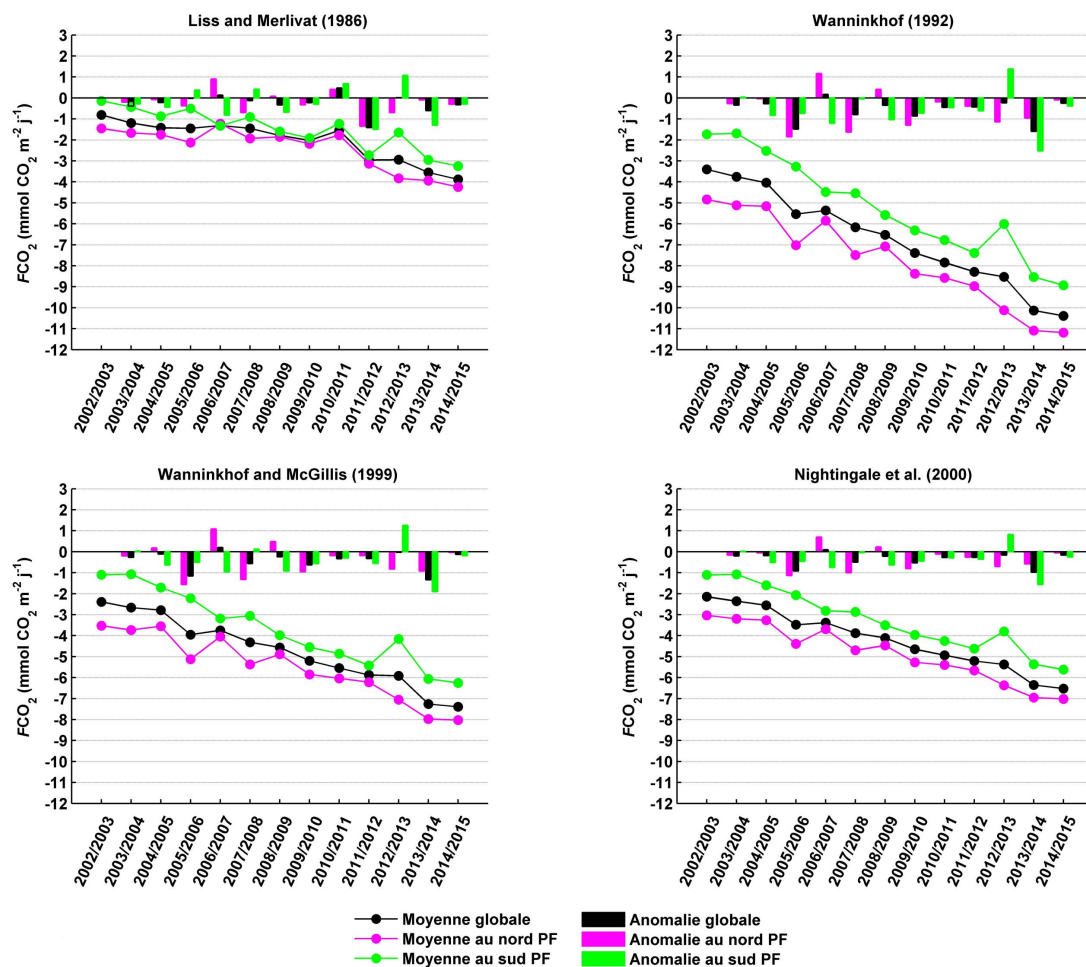


FIGURE G.24 – Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO₂ suivant les équations 1 à 4 du k .

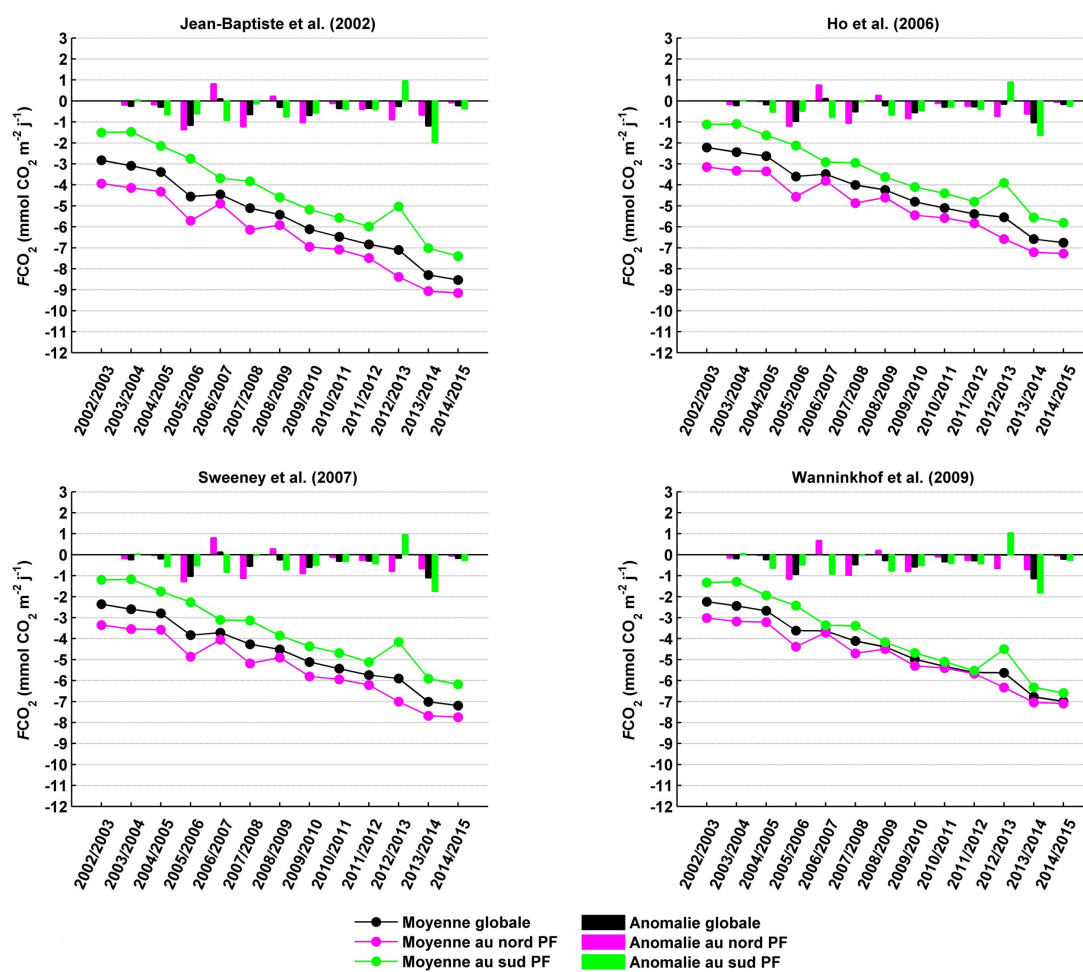


FIGURE G.25 – Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO₂ suivant les équations 5 à 8 du k .

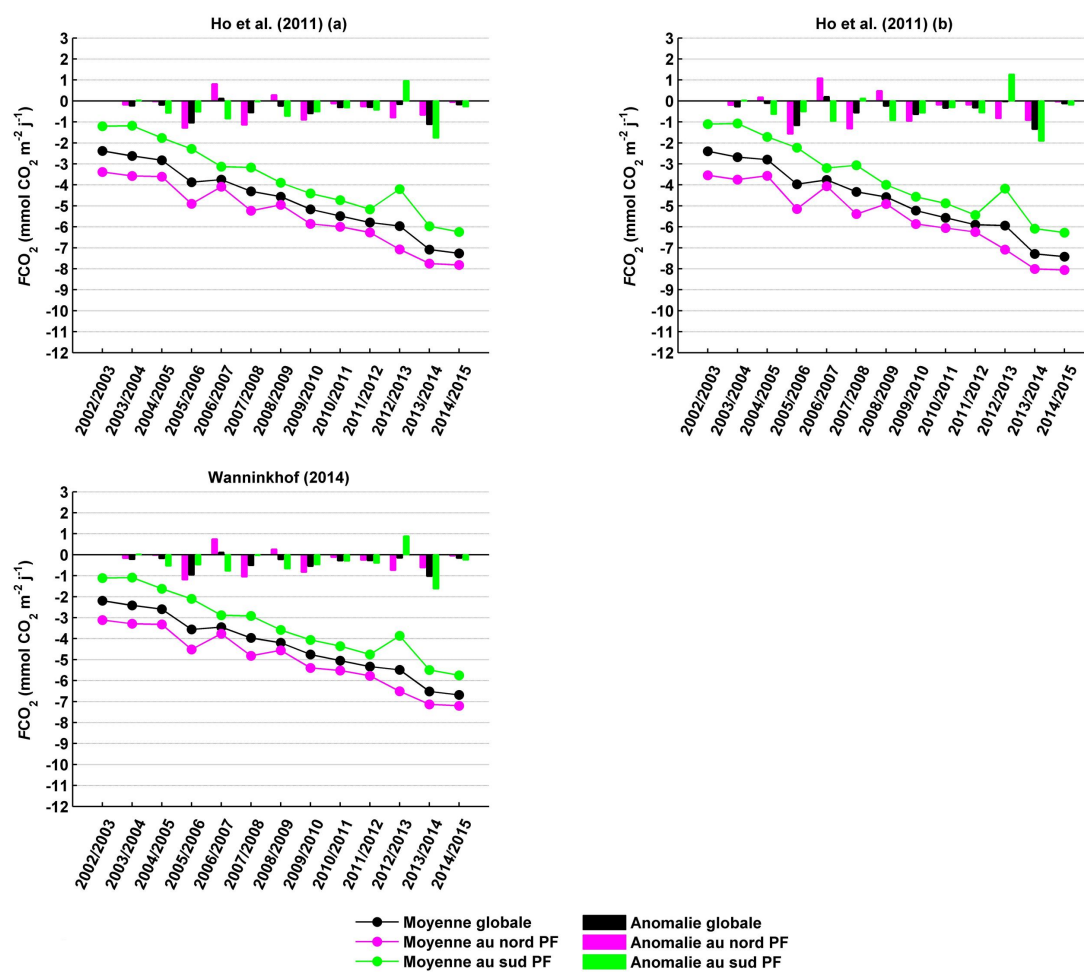
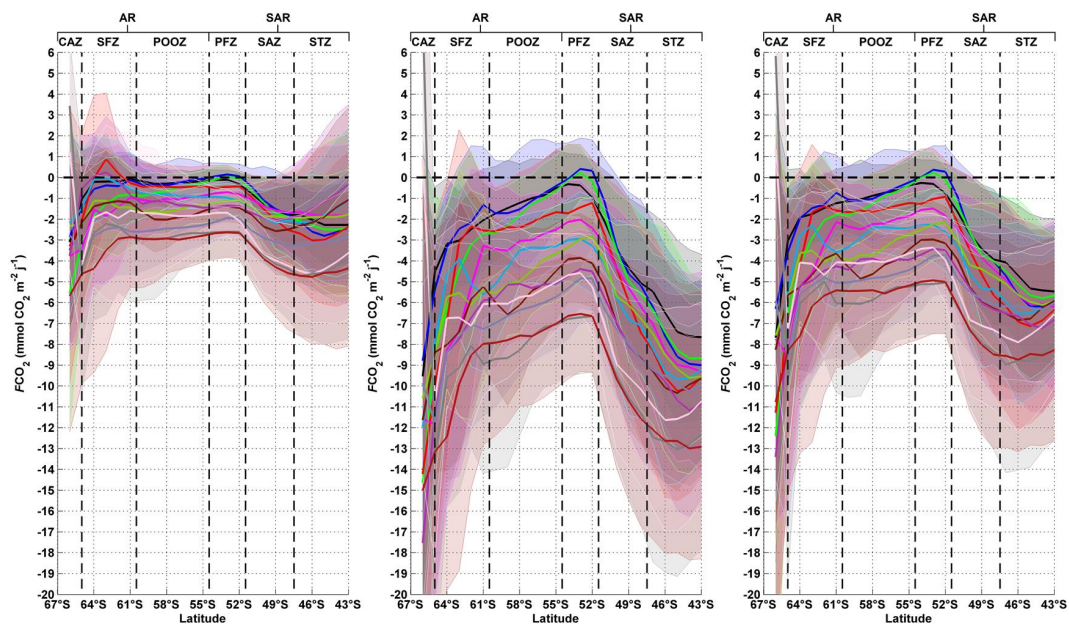
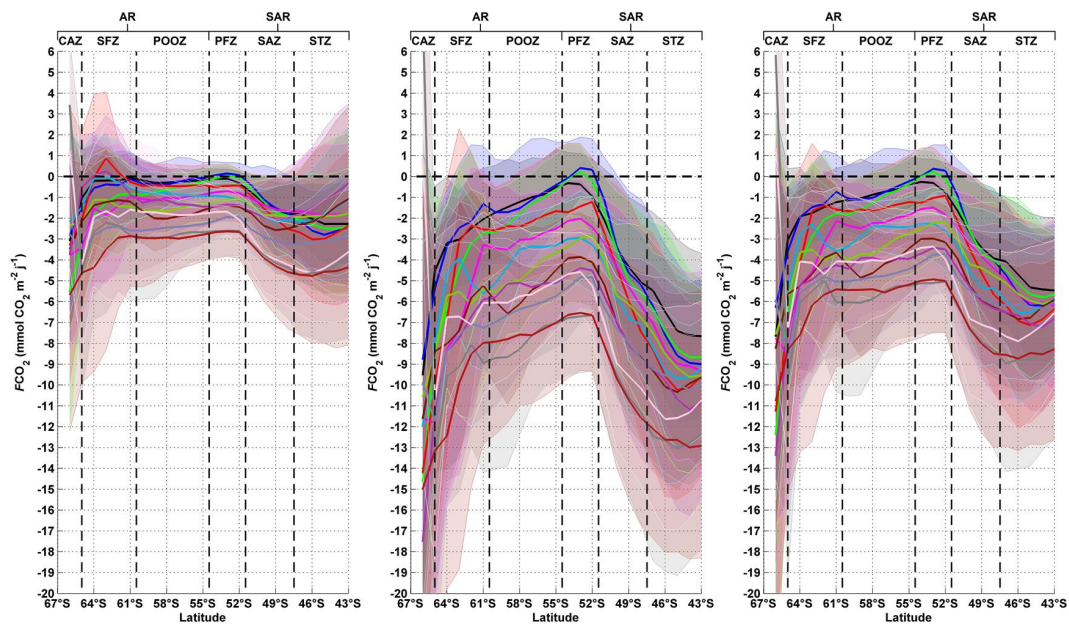
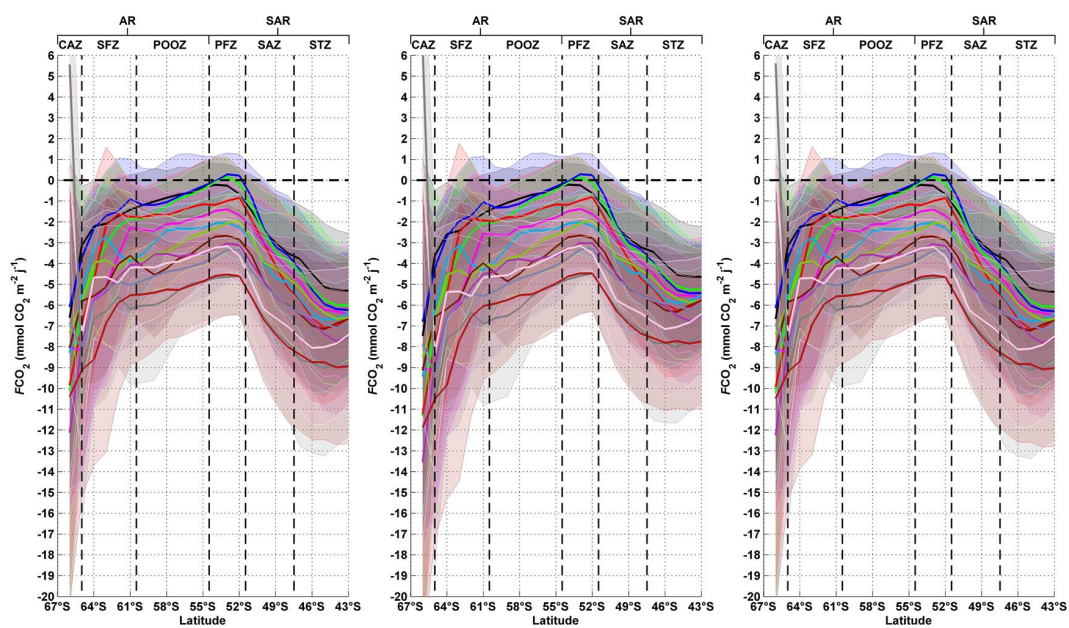
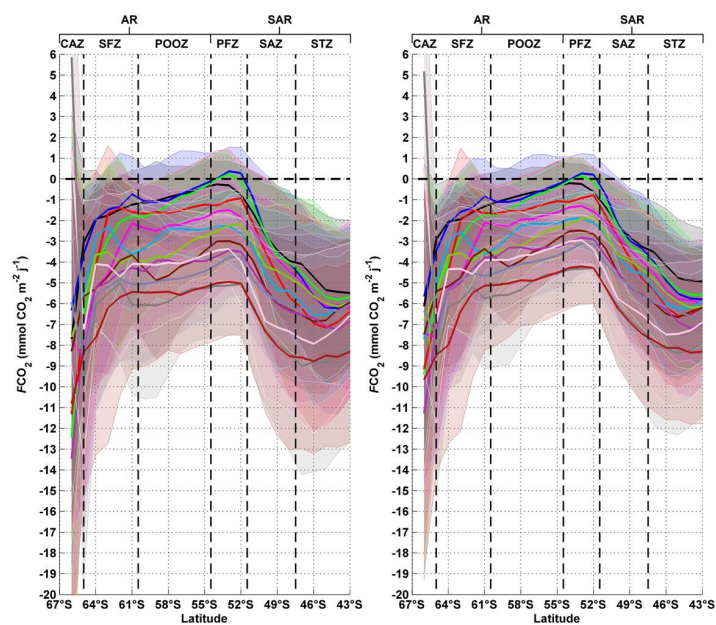


FIGURE G.26 – Variabilité inter-annuelle et anomalies du FCO₂ suivant les équations 9 à 11 du *k*.

G.5 Distribution latitudinale du FCO₂ (mmol CO₂.m⁻².j⁻¹) suivant toutes les équations

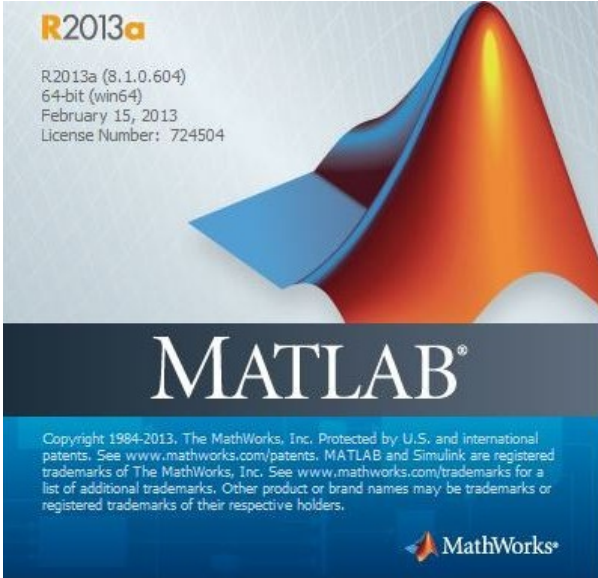
FIGURE G.27 – Distribution latitudinale du FCO₂ suivant toutes les équations 1 à 3.FIGURE G.28 – Distribution latitudinale du FCO₂ suivant toutes les équations 4 à 6.

FIGURE G.29 – Distribution latitudinale du FCO₂ suivant toutes les équations 7 à 9.FIGURE G.30 – Distribution latitudinale du FCO₂ suivant toutes les équations 10 à 11.

Annexe H

Spécifications techniques

La figure suivante présente les spécifications techniques du PC sur lequel s'est faite cette thèse ainsi que la version Matlab[®] sur laquelle ont été développées les codes sources.




R2013a
R2013a (8.1.0.604)
64-bit (win64)
February 15, 2013
License Number: 724504

MATLAB®

Copyright 1984-2013. The MathWorks, Inc. Protected by U.S. and international patents. See www.mathworks.com/patents. MATLAB and Simulink are registered trademarks of The MathWorks, Inc. See www.mathworks.com/trademarks for a list of additional trademarks. Other product or brand names may be trademarks or registered trademarks of their respective holders.

MathWorks®

CPU		Caches	Mainboard	Memory	SPD	Graphics	About
Processor							
Name	Intel Xeon E5 1650 v2						
Code Name	Ivy Bridge-EP/EX	Max TDP	130 W				
Package	Socket 2011 LGA						
Technology	22 nm	Core VID	0.831 V				
Specification							
Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1650 v2 @ 3.50GHz							
Family	6	Model	E	Stepping	4		
Ext. Family	6	Ext. Model	3E	Revision	S0/S1		
Instructions	MMX, SSE, SSE2, SSE3, SSSE3, SSE4.1, SSE4.2, EM64T, VT-x, AES, AVX						
Clocks (Core #0)				Cache			
Core Speed	1196.71 MHz			L1 Data	6 x 32 KBytes	8-way	
Multiplier	x 12.0 (12 - 39)			L1 Inst.	6 x 32 KBytes	8-way	
Bus Speed	99.73 MHz			Level 2	6 x 256 KBytes	8-way	
QPI Link	3191.24 MHz			Level 3	12 MBytes	16-way	
Selection		Processor #1		Cores	6	Threads	12

CPU		Caches	Mainboard	Memory	SPD	Graphics	About
Motherboard							
Manufacturer	Dell Inc.						
Model	09M8Y8	A01					
Chipset	Intel	Ivy Bridge-E	Rev.	04			
Southbridge	Intel	X79	Rev.	06			
LPCIO	SMSC						
BIOS							
Brand	Dell Inc.						
Version	A06						
Date	02/28/2014						
Graphic Interface							
Version	PCI-Express						
Link Width	x16	Max. Supported	x16				
Side Band							

CPU		Caches	Mainboard	Memory	SPD	Graphics	About
L1 D-Cache							
Size	32 KBytes	x 6					
Descriptor	8-way set associative, 64-byte line size						
L1 I-Cache							
Size	32 KBytes	x 6					
Descriptor	8-way set associative, 64-byte line size						
L2 Cache							
Size	256 KBytes	x 6					
Descriptor	8-way set associative, 64-byte line size						
L3 Cache							
Size	12 MBytes						
Descriptor	16-way set associative, 64-byte line size						
Size							
Descriptor							

CPU		Caches	Mainboard	Memory	SPD	Graphics	About
General							
Type	DDR3	Channel #	Quad				
Size	32714 MBytes	DC Mode					
		NB Frequency					
Timings							
DRAM Frequency	930.8 MHz						
FSB:DRAM	1:14						
CAS# Latency (CL)	13.0 clocks						
RAS# to CAS# Delay (tRCD)	13 clocks						
RAS# Precharge (tRP)	13 clocks						
Cycle Time (tRAS)	32 clocks						
Row Refresh Cycle Time (tRFC)	243 clocks						
Command Rate (CR)	1T						
DRAM Idle Timer							
Total CAS# (tRDRAM)							
Row To Column (tRCD)							


CPU		Caches	Mainboard	Memory	SPD	Graphics	About
Display Device Selection							
	NVIDIA Quadro K4000			Perf Level	Current		
GPU							
Name	NVIDIA Quadro K4000						
Board Manuf.	NVIDIA Corporation						
Code Name		Revision	A1				
Technology							
Clocks				Memory			
Core	324 MHz			Size	3072 MBytes		
Shaders				Type			
Memory	324 MHz			Bus Width			

FIGURE H.1 – Spécifications techniques du matériel et du logiciel utilisés.

Annexe I

Copyrights et permissions d'utilisation

Cette annexe regroupe tout les copyrights pour l'utilisation de certaines figures ; dans l'ordre : la figure 1.1, la figure 1.8 et la figure 1.10. Toutes les autres figures utilisé sont soit du domaine public, soit ont une permission d'utilisation en citant la source.

NATURE PUBLISHING GROUP LICENSE TERMS AND CONDITIONS

Jun 10, 2016

This Agreement between Mohamed Anis BENALLAL ("You") and Nature Publishing Group ("Nature Publishing Group") consists of your license details and the terms and conditions provided by Nature Publishing Group and Copyright Clearance Center.

License Number	3878670576930
License date	May 30, 2016
Licensed Content Publisher	Nature Publishing Group
Licensed Content Publication	Nature
Licensed Content Title	Ocean circulation and climate during the past 120,000 years
Licensed Content Author	Stefan Rahmstorf
Licensed Content Date	Sep 12, 2002
Licensed Content Volume Number	419
Licensed Content Issue Number	6903
Type of Use	reuse in a dissertation / thesis
Requestor type	academic/educational
Format	print and electronic
Portion	figures/tables/illustrations
Number of figures/tables/illustrations	1
High-res required	no
Figures	OCEAN CURRENTS
Author of this NPG article	no
Your reference number	
Title of your thesis / dissertation	Analyse d'images satellitaires et développement d'outils informatiques pour modéliser le transfert de CO2 à l'interface air-mer dans les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien)
Expected completion date	Sep 2016
Estimated size (number of pages)	300
Requestor Location	Mohamed Anis BENALLAL 18 Bis AV ALFRED SAUVY Rce CANIGOU Apt 8C106 PERPIGNAN, 66100 France Attn: Mohamed Anis BENALLAL
Billing Type	Invoice
Billing Address	Mohamed Anis BENALLAL 18 Bis AV ALFRED SAUVY Rce CANIGOU Apt 8C106 PERPIGNAN, France 66100 Attn: Mohamed Anis BENALLAL
Total	0.00 EUR
Total	0.00 EUR
Terms and Conditions	

Terms and Conditions for Permissions

Nature Publishing Group hereby grants you a non-exclusive license to reproduce this material for this purpose, and for no other use, subject to the conditions below:

1. NPG warrants that it has, to the best of its knowledge, the rights to license reuse of this material. However, you should ensure that the material you are requesting is original to Nature Publishing Group and does not carry the copyright of another entity (as credited in the published version). If the credit line on any part of the material you have requested indicates that it was reprinted or adapted by NPG with permission from another source, then you should also seek permission from that source to reuse the material.
2. Permission granted free of charge for material in print is also usually granted for any electronic version of that work, provided that the material is incidental to the work as a whole and that the electronic version is essentially equivalent to, or substitutes for, the print version. Where print permission has been granted for a fee, separate permission must be obtained for any additional, electronic re-use (unless, as in the case of a full paper, this has already been accounted for during your initial request in the calculation of a print run). NB: In all cases, web-based use of full-text articles must be authorized separately through the 'Use on a Web Site' option when requesting permission.
3. Permission granted for a first edition does not apply to second and subsequent editions and for editions in other languages (except for signatories to the STM Permissions Guidelines, or where the first edition permission was granted for free).
4. Nature Publishing Group's permission must be acknowledged next to the figure, table or abstract in print. In electronic form, this acknowledgement must be visible at the same time as the figure/table/abstract, and must be hyperlinked to the journal's homepage.
5. The credit line should read:
 Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
 For AOP papers, the credit line should read:
 Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME], advance online publication, day month year (doi: 10.1038/sj.[JOURNAL ACRONYM].XXXXX)
Note: For republication from the *British Journal of Cancer*, the following credit lines apply.
 Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
 For AOP papers, the credit line should read:
 Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME], advance online publication, day month year (doi: 10.1038/sj.[JOURNAL ACRONYM].XXXXX)
6. Adaptations of single figures do not require NPG approval. However, the adaptation should be credited as follows:
 Adapted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
Note: For adaptation from the *British Journal of Cancer*, the following credit line applies.
 Adapted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
7. Translations of 401 words up to a whole article require NPG approval. Please visit <http://www.macmillanmedicalcommunications.com> for more information. Translations of up to a 400 words do not require NPG approval. The translation should be credited as follows:
 Translated by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication).
Note: For translation from the *British Journal of Cancer*, the following credit line applies.
 Translated by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)

We are certain that all parties will benefit from this agreement and wish you the best in the use of this material. Thank you.

Special Terms:1.1

Questions? customercare@copyright.com or +1-855-239-3415 (toll free in the US) or +1-978-646-2777.

ELSEVIER LICENSE TERMS AND CONDITIONS

Jun 10, 2016

This Agreement between Mohamed Anis BENALLAL ("You") and Elsevier ("Elsevier") consists of your license details and the terms and conditions provided by Elsevier and Copyright Clearance Center.

License Number	3885370242125
License date	Jun 10, 2016
Licensed Content Publisher	Elsevier
Licensed Content Publication	Journal of Marine Systems
Licensed Content Title	CO2 in Seawater: Equilibrium, Kinetics, Isotopes Richard E. Zeebe and Dieter Wolf-Gladrow, Elsevier Oceanography Series 65, Amsterdam, 2001, (Paperback) ISBN: 0444509461
Licensed Content Author	Bruno Delille
Licensed Content Date	October 2002
Licensed Content Volume Number	36
Licensed Content Issue Number	3-4
Licensed Content Pages	2
Start Page	269
End Page	270
Type of Use	reuse in a thesis/dissertation
Intended publisher of new work	other
Portion	figures/tables/illustrations
Number of figures/tables/illustrations	1
Format	both print and electronic
Are you the author of this Elsevier article?	No
Will you be translating?	Yes
Number of languages	1
Languages	French
Order reference number	
Original figure numbers	Figure 1.1.3
Title of your thesis/dissertation	Analyse d'images satellitaires et développement d'outils informatiques pour modéliser le transfert de CO2 à l'interface air-mer dans les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien)
Expected completion date	Sep 2016
Estimated size (number of pages)	300
Elsevier VAT number	GB 494 6272 12
Requestor Location	Mohamed Anis BENALLAL 18 Bis AV ALFRED SAUVY Rce CANIGOU Apt 8C106 PERPIGNAN, 66100 France Attn: Mohamed Anis BENALLAL
Total	0.00 EUR
Terms and Conditions	

INTRODUCTION

1. The publisher for this copyrighted material is Elsevier. By clicking "accept" in connection with completing this licensing transaction, you agree that the following terms and conditions apply to this transaction (along with the Billing and Payment terms and conditions established by Copyright Clearance Center, Inc. ("CCC"), at the time that you opened your Rightslink account and that are available at any time at <http://myaccount.copyright.com>).

GENERAL TERMS

2. Elsevier hereby grants you permission to reproduce the aforementioned material subject to the terms and conditions indicated.

3. Acknowledgement: If any part of the material to be used (for example, figures) has appeared in our publication with credit or acknowledgement to another source, permission must also be sought from that source. If such permission is not obtained then that material may not be included in your publication/copies. Suitable acknowledgement to the source must be made, either as a footnote or in a reference list at the end of your publication, as follows:

"Reprinted from Publication title, Vol /edition number, Author(s), Title of article / title of chapter, Pages No., Copyright (Year), with permission from Elsevier [OR APPLICABLE SOCIETY COPYRIGHT OWNER]." Also Lancet special credit - "Reprinted from The Lancet, Vol. number, Author(s), Title of article, Pages No., Copyright (Year), with permission from Elsevier."

4. Reproduction of this material is confined to the purpose and/or media for which permission is hereby given.

5. Altering/Modifying Material: Not Permitted. However figures and illustrations may be altered/adapted minimally to serve your work. Any other abbreviations, additions, deletions and/or any other alterations shall be made only with prior written authorization of Elsevier Ltd. (Please contact Elsevier at permissions@elsevier.com)

6. If the permission fee for the requested use of our material is waived in this instance, please be advised that your future requests for Elsevier materials may attract a fee.

7. Reservation of Rights: Publisher reserves all rights not specifically granted in the combination of (i) the license details provided by you and accepted in the course of this licensing transaction, (ii) these terms and conditions and (iii) CCC's Billing and Payment terms and conditions.

8. License Contingent Upon Payment: While you may exercise the rights licensed immediately upon issuance of the license at the end of the licensing process for the transaction, provided that you have disclosed complete and accurate details of your proposed use, no license is finally effective unless and until full payment is received from you (either by publisher or by CCC) as provided in CCC's Billing and Payment terms and conditions. If full payment is not received on a timely basis, then any license preliminarily granted shall be deemed automatically revoked and shall be void as if never granted. Further, in the event that you breach any of these terms and conditions or any of CCC's Billing and Payment terms and conditions, the license is automatically revoked and shall be void as if never granted. Use of materials as described in a revoked license, as well as any use of the materials beyond the scope of an unrevoked license, may constitute copyright infringement and publisher reserves the right to take any and all action to protect its copyright in the materials.

9. Warranties: Publisher makes no representations or warranties with respect to the licensed material.

10. Indemnity: You hereby indemnify and agree to hold harmless publisher and CCC, and their respective officers, directors, employees and agents, from and against any and all claims arising out of your use of the licensed material other than as specifically authorized pursuant to this license.

11. No Transfer of License: This license is personal to you and may not be sublicensed, assigned, or transferred by you to any other person without publisher's written permission.

12. No Amendment Except in Writing: This license may not be amended except in a writing signed by both parties (or, in the case of publisher, by CCC on publisher's behalf).

13. Objection to Contrary Terms: Publisher hereby objects to any terms contained in any purchase order, acknowledgment, check endorsement or other writing prepared by you, which terms are inconsistent with these terms and conditions or CCC's Billing and Payment terms and conditions. These terms and conditions, together with CCC's Billing and Payment terms and conditions (which are incorporated herein), comprise the entire agreement between you and publisher (and CCC) concerning this licensing transaction. In the event of any conflict between your obligations established by these terms and conditions and

those established by CCC's Billing and Payment terms and conditions, these terms and conditions shall control.

14. **Revocation:** Elsevier or Copyright Clearance Center may deny the permissions described in this License at their sole discretion, for any reason or no reason, with a full refund payable to you. Notice of such denial will be made using the contact information provided by you. Failure to receive such notice will not alter or invalidate the denial. In no event will Elsevier or Copyright Clearance Center be responsible or liable for any costs, expenses or damage incurred by you as a result of a denial of your permission request, other than a refund of the amount(s) paid by you to Elsevier and/or Copyright Clearance Center for denied permissions.

LIMITED LICENSE

The following terms and conditions apply only to specific license types:

15. **Translation:** This permission is granted for non-exclusive world **English** rights only unless your license was granted for translation rights. If you licensed translation rights you may only translate this content into the languages you requested. A professional translator must perform all translations and reproduce the content word for word preserving the integrity of the article.

16. **Posting licensed content on any Website:** The following terms and conditions apply as follows: Licensing material from an Elsevier journal: All content posted to the web site must maintain the copyright information line on the bottom of each image; A hyper-text must be included to the Homepage of the journal from which you are licensing at <http://www.sciencedirect.com/science/journal/xxxx> or the Elsevier homepage for books at <http://www.elsevier.com>; Central Storage: This license does not include permission for a scanned version of the material to be stored in a central repository such as that provided by Heron/XanEdu.

Licensing material from an Elsevier book: A hyper-text link must be included to the Elsevier homepage at <http://www.elsevier.com>. All content posted to the web site must maintain the copyright information line on the bottom of each image.

Posting licensed content on Electronic reserve: In addition to the above the following clauses are applicable: The web site must be password-protected and made available only to bona fide students registered on a relevant course. This permission is granted for 1 year only. You may obtain a new license for future website posting.

17. **For journal authors:** the following clauses are applicable in addition to the above:

Preprints:

A preprint is an author's own write-up of research results and analysis, it has not been peer-reviewed, nor has it had any other value added to it by a publisher (such as formatting, copyright, technical enhancement etc.).

Authors can share their preprints anywhere at any time. Preprints should not be added to or enhanced in any way in order to appear more like, or to substitute for, the final versions of articles however authors can update their preprints on arXiv or RePEc with their Accepted Author Manuscript (see below).

If accepted for publication, we encourage authors to link from the preprint to their formal publication via its DOI. Millions of researchers have access to the formal publications on ScienceDirect, and so links will help users to find, access, cite and use the best available version. Please note that Cell Press, The Lancet and some society-owned have different preprint policies. Information on these policies is available on the journal homepage.

Accepted Author Manuscripts: An accepted author manuscript is the manuscript of an article that has been accepted for publication and which typically includes author-incorporated changes suggested during submission, peer review and editor-author communications.

Authors can share their accepted author manuscript:

- – immediately
 - via their non-commercial person homepage or blog
 - by updating a preprint in arXiv or RePEc with the accepted manuscript
 - via their research institute or institutional repository for internal institutional uses or as part of an invitation-only research collaboration work-group

- directly by providing copies to their students or to research collaborators for their personal use
- for private scholarly sharing as part of an invitation-only work group on commercial sites with which Elsevier has an agreement
- – after the embargo period
 - via non-commercial hosting platforms such as their institutional repository
 - via commercial sites with which Elsevier has an agreement

In all cases accepted manuscripts should:

- – link to the formal publication via its DOI
- – bear a CC-BY-NC-ND license - this is easy to do
- – if aggregated with other manuscripts, for example in a repository or other site, be shared in alignment with our hosting policy not be added to or enhanced in any way to appear more like, or to substitute for, the published journal article.

Published journal article (JPA): A published journal article (PJA) is the definitive final record of published research that appears or will appear in the journal and embodies all value-adding publishing activities including peer review co-ordination, copy-editing, formatting, (if relevant) pagination and online enrichment.

Policies for sharing publishing journal articles differ for subscription and gold open access articles:

Subscription Articles: If you are an author, please share a link to your article rather than the full-text. Millions of researchers have access to the formal publications on ScienceDirect, and so links will help your users to find, access, cite, and use the best available version.

Theses and dissertations which contain embedded PJAs as part of the formal submission can be posted publicly by the awarding institution with DOI links back to the formal publications on ScienceDirect.

If you are affiliated with a library that subscribes to ScienceDirect you have additional private sharing rights for others' research accessed under that agreement. This includes use for classroom teaching and internal training at the institution (including use in course packs and courseware programs), and inclusion of the article for grant funding purposes.

Gold Open Access Articles: May be shared according to the author-selected end-user license and should contain a [CrossMark logo](#), the end user license, and a DOI link to the formal publication on ScienceDirect.

Please refer to Elsevier's [posting policy](#) for further information.

18. For book authors the following clauses are applicable in addition to the above: Authors are permitted to place a brief summary of their work online only. You are not allowed to download and post the published electronic version of your chapter, nor may you scan the printed edition to create an electronic version. **Posting to a repository:** Authors are permitted to post a summary of their chapter only in their institution's repository.

19. Thesis/Dissertation: If your license is for use in a thesis/dissertation your thesis may be submitted to your institution in either print or electronic form. Should your thesis be published commercially, please reapply for permission. These requirements include permission for the Library and Archives of Canada to supply single copies, on demand, of the complete thesis and include permission for Proquest/UMI to supply single copies, on demand, of the complete thesis. Should your thesis be published commercially, please reapply for permission. Theses and dissertations which contain embedded PJAs as part of the formal submission can be posted publicly by the awarding institution with DOI links back to the formal publications on ScienceDirect.

Elsevier Open Access Terms and Conditions

You can publish open access with Elsevier in hundreds of open access journals or in nearly 2000 established subscription journals that support open access publishing. Permitted third party re-use of these open access articles is defined by the author's choice of Creative Commons user license. See our [open access license policy](#) for more information.

Terms & Conditions applicable to all Open Access articles published with Elsevier:

Any reuse of the article must not represent the author as endorsing the adaptation of the article nor should the article be modified in such a way as to damage the author's honour or reputation. If any changes have been made, such changes must be clearly indicated.

The author(s) must be appropriately credited and we ask that you include the end user license and a DOI link to the formal publication on ScienceDirect.

If any part of the material to be used (for example, figures) has appeared in our publication with credit or acknowledgement to another source it is the responsibility of the user to ensure their reuse complies with the terms and conditions determined by the rights holder.

Additional Terms & Conditions applicable to each Creative Commons user license:

CC BY: The CC-BY license allows users to copy, to create extracts, abstracts and new works from the Article, to alter and revise the Article and to make commercial use of the Article (including reuse and/or resale of the Article by commercial entities), provided the user gives appropriate credit (with a link to the formal publication through the relevant DOI), provides a link to the license, indicates if changes were made and the licensor is not represented as endorsing the use made of the work. The full details of the license are available at <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>.

CC BY NC SA: The CC BY-NC-SA license allows users to copy, to create extracts, abstracts and new works from the Article, to alter and revise the Article, provided this is not done for commercial purposes, and that the user gives appropriate credit (with a link to the formal publication through the relevant DOI), provides a link to the license, indicates if changes were made and the licensor is not represented as endorsing the use made of the work. Further, any new works must be made available on the same conditions. The full details of the license are available at <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0>.

CC BY NC ND: The CC BY-NC-ND license allows users to copy and distribute the Article, provided this is not done for commercial purposes and further does not permit distribution of the Article if it is changed or edited in any way, and provided the user gives appropriate credit (with a link to the formal publication through the relevant DOI), provides a link to the license, and that the licensor is not represented as endorsing the use made of the work. The full details of the license are available at <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0>. Any commercial reuse of Open Access articles published with a CC BY NC SA or CC BY NC ND license requires permission from Elsevier and will be subject to a fee.

Commercial reuse includes:

- – Associating advertising with the full text of the Article
- – Charging fees for document delivery or access
- – Article aggregation
- – Systematic distribution via e-mail lists or share buttons

Posting or linking by commercial companies for use by customers of those companies.

20. Other Conditions:

v1.8

Questions? customercare@copyright.com or +1-855-239-3415 (toll free in the US) or +1-978-646-2777.

NATURE PUBLISHING GROUP LICENSE TERMS AND CONDITIONS

Jun 10, 2016

This Agreement between Mohamed Anis BENALLAL ("You") and Nature Publishing Group ("Nature Publishing Group") consists of your license details and the terms and conditions provided by Nature Publishing Group and Copyright Clearance Center.

License Number	3878710813847
License date	May 30, 2016
Licensed Content Publisher	Nature Publishing Group
Licensed Content Publication	Nature Climate Change
Licensed Content Title	The role of satellite remote sensing in climate change studies
Licensed Content Author	Jun Yang, Peng Gong, Rong Fu, Minghua Zhang, Jingming Chen, Shunlin Liang
Licensed Content Date	Sep 15, 2013
Licensed Content Volume Number	3
Licensed Content Issue Number	10
Type of Use	reuse in a dissertation / thesis
Requestor type	academic/educational
Format	print and electronic
Portion	figures/tables/illustrations
Number of figures/tables/illustrations	1
High-res required	no
Figures	Figure 1: Remote sensing of the climate system.
Author of this NPG article	no
Your reference number	
Title of your thesis / dissertation	Analyse d'images satellitaires et développement d'outils informatiques pour modéliser le transfert de CO2 à l'interface air-mer dans les régions subantarctique et antarctique (secteur Australien)
Expected completion date	Sep 2016
Estimated size (number of pages)	300
Requestor Location	Mohamed Anis BENALLAL 18 Bis AV ALFRED SAUVY Rce CANIGOU Apt 8C106 PERPIGNAN, 66100 France Attn: Mohamed Anis BENALLAL
Billing Type	Invoice
Billing Address	Mohamed Anis BENALLAL 18 Bis AV ALFRED SAUVY Rce CANIGOU Apt 8C106 PERPIGNAN, France 66100 Attn: Mohamed Anis BENALLAL
Total	0.00 EUR
Total	0.00 EUR
Terms and Conditions	

Terms and Conditions for Permissions

Nature Publishing Group hereby grants you a non-exclusive license to reproduce this material for this purpose, and for no other use, subject to the conditions below:

1. NPG warrants that it has, to the best of its knowledge, the rights to license reuse of this material. However, you should ensure that the material you are requesting is original to Nature Publishing Group and does not carry the copyright of another entity (as credited in the published version). If the credit line on any part of the material you have requested indicates that it was reprinted or adapted by NPG with permission from another source, then you should also seek permission from that source to reuse the material.
2. Permission granted free of charge for material in print is also usually granted for any electronic version of that work, provided that the material is incidental to the work as a whole and that the electronic version is essentially equivalent to, or substitutes for, the print version. Where print permission has been granted for a fee, separate permission must be obtained for any additional, electronic re-use (unless, as in the case of a full paper, this has already been accounted for during your initial request in the calculation of a print run). NB: In all cases, web-based use of full-text articles must be authorized separately through the 'Use on a Web Site' option when requesting permission.
3. Permission granted for a first edition does not apply to second and subsequent editions and for editions in other languages (except for signatories to the STM Permissions Guidelines, or where the first edition permission was granted for free).
4. Nature Publishing Group's permission must be acknowledged next to the figure, table or abstract in print. In electronic form, this acknowledgement must be visible at the same time as the figure/table/abstract, and must be hyperlinked to the journal's homepage.
5. The credit line should read:
Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
For AOP papers, the credit line should read:
Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME], advance online publication, day month year (doi: 10.1038/sj.[JOURNAL ACRONYM].XXXXX)

Note: For republication from the *British Journal of Cancer*, the following credit lines apply.

Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)
For AOP papers, the credit line should read:
Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME], advance online publication, day month year (doi: 10.1038/sj.[JOURNAL ACRONYM].XXXXX)

Adaptations of single figures do not require NPG approval. However, the adaptation should be credited as follows:

Adapted by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)

Note: For adaptation from the *British Journal of Cancer*, the following credit line applies.

Adapted by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)

6. Translations of 401 words up to a whole article require NPG approval. Please visit <http://www.macmillanmedicalcommunications.com> for more information. Translations of up to a 400 words do not require NPG approval. The translation should be credited as follows:

Translated by permission from Macmillan Publishers Ltd: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication).

Note: For translation from the *British Journal of Cancer*, the following credit line applies.

Translated by permission from Macmillan Publishers Ltd on behalf of Cancer Research UK: [JOURNAL NAME] (reference citation), copyright (year of publication)

We are certain that all parties will benefit from this agreement and wish you the best in the use of this material. Thank you.

Special Terms:v1.1 Questions? customercare@copyright.com or +1-855-239-3415 (toll free in the US) or +1-978-646-777.

**ANALYSE D'IMAGES SATELLITAIRES ET DEVELOPPEMENT D'OUTILS
INFORMATIQUES POUR MODELISER LE TRANSFERT DE CO₂ A L'INTERFACE AIR-
MER DANS LES REGIONS SUBANTARCTIQUE ET ANTARCTIQUE (SECTEUR
AUSTRALIEN).**

Doctorant : BENALLAL Mohamed Anis / **Discipline :** Informatique
Directeur de thèse : TOURATIER Franck

Résumé :

Un algorithme de calcul du flux air-mer de CO₂ en utilisant les données satellitaires (*sat*) est développé et présenté dans cette thèse. Les paramètres utilisés pour ce calcul sont : la température à la surface de l'océan (SST) et la chlorophylle_a du satellite MODIS_{Aqua}, la salinité (SSS) estimée par la SST de MODIS_{Aqua} en utilisant la RLM, la fugacité du CO₂ dans l'eau ($f\text{CO}_2^{\text{eau}}$) estimée par la SST et la Chl_a de MODIS_{Aqua} en utilisant les FNNs, le CO₂ atmosphérique de la station Cape Grim et la vitesse du vent des deux satellites ASQAT et QSCAT. Les données *in situ* récoltées sur le RV L'Astrolabe sont utilisées pour créer et valider les modèles. Ces derniers sont testés en utilisant les données *sat*. Cette étude se focalise sur le secteur australien de l'océan austral. Les résultats montrent une amélioration de l'estimation de SSS par *sat* avec une précision de ± 0.16 en utilisant la SST et la latitude, une bonne estimation de la $f\text{CO}_2^{\text{eau}}$ d'une précision de $\pm 9.45 \mu\text{atm}$ et un calcul du $F\text{CO}_2$ avec une erreur de $\pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$. Les programmes et modèle développés dans cette thèse ont permis d'interpoler le $F\text{CO}_2$. Dans la période du printemps à l'été austral, cette région devient de plus en plus un puits de CO₂ atmosphérique au fil des années.

Mots-clés : Algorithme, modélisation, flux, CO₂, satellite, océan, austral, température, salinité, fugacité.

**REMOTE SENSING IMAGE ANALYSIS AND IT TOOLS DEVELOPMENT FOR
MODELING THE TRANSFER OF CO₂ IN THE AIR-SEA INTERFACE IN THE SUB-
ANTARCTIC AND ANTARCTIC REGIONS (AUSTRALIAN SECTOR)**

PhD student: BENALLAL Mohamed Anis / **Discipline:** Computer Science
Supervisor: TOURATIER Franck

Abstract:

A step by step algorithm for air-sea CO₂ flux ($F\text{CO}_2$) calculation from satellite (*sat*) parameters is developed and presented in this thesis. Parameters used for this calculation are: sea surface temperature (SST) and chlorophyll_a (Chl_a) from MODIS_{Aqua} satellite, sea surface salinity (SSS) estimated from MODIS_{Aqua} SST using MLR, seawater CO₂ fugacity ($f\text{CO}_2^{\text{sw}}$) estimated by MODIS_{Aqua} SST and chl_a using FNN, atmospheric CO₂ fugacity from the Cape Grim station and wind speed from QSCAT and ASCAT satellites. *In situ* data provided by several projects collected on the RVL'Astrolabe, are used to establish and validate the models. These models are then tested using *sat* data. This work focus on the Australian sector of the southern ocean. Results show: an improvement of satellite SSS estimation with a precision of ± 0.16 using SST and latitude, an estimation of $f\text{CO}_2^{\text{sw}}$ with a good accuracy of $\pm 9.45 \mu\text{atm}$ and a calculation of $F\text{CO}_2$ with a global RMSE of about $\pm 3 \text{ mmol CO}_2 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$. Programs and models developed in this study allow us to interpolate $F\text{CO}_2$. In the period of austral spring and summer, this region is becoming a stronger sink of atmospheric CO₂ throughout the years.

Key-words: Algorithm, modeling, flux, CO₂, satellite, ocean, southern, temperature, salinity, fugacity.