



Cartographie dynamique de la topographie de l'océan de surface par assimilation de données altimétriques

Florian Le Guillou

► To cite this version:

Florian Le Guillou. Cartographie dynamique de la topographie de l'océan de surface par assimilation de données altimétriques. Sciences de la Terre. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2022. Français.
NNT : 2022GRALU017 . tel-03775828

HAL Id: tel-03775828

<https://theses.hal.science/tel-03775828v1>

Submitted on 13 Sep 2022

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 DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

Spécialité : Océan, Atmosphère, Hydrologie

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Florian LE GUILLOU

Thèse dirigée par **Emmanuel COSME**, Enseignant-chercheur,
Université Grenoble Alpes

préparée au sein du **Laboratoire Institut des Géosciences de l'Environnement**
dans l'**École Doctorale Sciences de la Terre de l'Environnement et des Planètes**

Cartographie dynamique de la topographie de l'océan de surface par assimilation de données altimétriques

Dynamic mapping of ocean surface topography by altimetric data assimilation

Thèse soutenue publiquement le **31 mai 2022**,
devant le jury composé de :

Monsieur Emmanuel COSME

MAITRE DE CONFERENCES HDR, Université Grenoble Alpes, Directeur de thèse

Monsieur Marc BOCQUET

PROFESSEUR, Ecole des Ponts ParisTech, Rapporteur

Madame Marie-Hélène RIO

INGENIEUR DOCTEUR, European Space Agency, Examinatrice

Madame Rosemary MORROW

PHYSICIEN, Université Toulouse 3 - Paul Sabatier, Examinatrice

Madame Sarah GILLE

PROFESSEUR, University of California, San Diego, Rapporteure

Madame Loren CARRERE

INGENIEUR DOCTEUR, Collecte Localisation Sattellites, Examinatrice

Madame Anne-Catherine FAVRE

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Grenoble Alpes,
Présidente



Résumé

Depuis plus de 20 ans, l’altimétrie satellitaire nadir a révolutionné notre compréhension de la dynamique océanique de mésoéchelle en produisant des mesures très précises du niveau de la mer (SSH; pour Sea Surface Height). Pour un grand nombre d’applications, les données 1D de SSH doivent être interpolées sur des cartes 2D régulières en temps et en espace. Aujourd’hui, ces cartes sont générées quotidiennement à une résolution de $1/4^\circ$ par un algorithme d’interpolation optimale implémenté de manière opérationnelle au sein du système DUACS. Cependant, la résolution spatiale de ces cartes, principalement limitée par l’échantillonnage de l’altimétrie nadir, ne permet pas d’observer convenablement les structures de sous-mésoéchelle, que l’on sait essentielles pour la compréhension, la modélisation et la prévision du système climatique. La nouvelle mission altimétrique à large fauchée SWOT (pour Surface Water Ocean Topography) sera lancée à la fin de l’année 2022. SWOT permettra l’observation de processus à des échelles de 15-30 km. Cependant, l’algorithme d’interpolation linéaire actuellement implanté dans la chaîne DUACS doit être amélioré pour tenir compte de la dynamique non-linéaire des structures rapides de sous-mésoéchelle. De plus, il faudra distinguer les mouvements autour de l’équilibre géostrophique de ceux des ondes de marée interne pour étudier convenablement les dynamiques associées.

Dans cette thèse, nous avons exploré la capacité de la mission SWOT à répondre à ses objectifs scientifiques en développant des outils innovants pour cartographier la SSH à haute résolution tout en séparant les dynamiques équilibrée et ondulatoire. Pour cela, la stratégie a été d’inclure la dynamique de l’océan dans les outils de cartographie de SSH sous forme d’assimilation de données avec des modèles physiques simples et adaptés à chaque dynamique.

La première étape de notre travail a été d’appliquer la méthode du Back-and-Forth-Nudging (BFN) appliquée à un modèle Quasi-Géostrophique à une couche et demie (méthode dite du BFN-QG) pour cartographier la dynamique équilibrée de la SSH. Cette technique est testée avec des observations simulées et réelles. Les résultats montrent que le BFN-QG permet de réduire substantiellement les erreurs de cartographie comparé au système DUACS et que cette réduction est amplifiée lorsque SWOT est ajouté à la constellation d’altimètres nadirs. Par contre, les données nadirs se révèlent nécessaires pour contraindre les grandes échelles

spatiales lorsque les données SWOT sont polluées par des erreurs spatialement corrélées. De plus, les performances sont réduites lorsque la dynamique équilibrée est faiblement énergétique.

Dans un second temps, nous avons traité la problématique de séparation des dynamiques équilibrée et ondulatoire. Pour cela, nous avons développé un 4Dvar assimilant les observations de SSH dans un modèle Shallow-Water linéaire pour estimer la dynamique de marée interne (méthode dite du 4Dvar-SW). Un atout essentiel du 4Dvar-SW est sa capacité à estimer la marée interne non-stationnaire. Deux stratégies de séparation sont présentées. La première implémente un algorithme de minimisation alternée qui combine itérativement le BFN-QG et le 4Dvar-SW. Bien que testée dans un contexte idéalisé, cette technique semble prometteuse pour cartographier et séparer les contributions des deux dynamiques. Les résultats montrent que l'échantillonnage temporel des observations est déterminant pour estimer correctement la dynamique de marée interne, et par extension la dynamique équilibrée. La seconde stratégie repose sur l'implémentation d'un 4Dvar global en bases réduites et une contribution additive des deux modèles réduits. Cette technique est testée dans le cadre réaliste de la phase de calibration et validation au large de la Californie et les performances sont une nouvelles fois prometteuses, en particulier pour estimer la composante non-stationnaire de la marée interne.

Abstract

For more than 20 years, nadir satellite altimetry has revolutionized our understanding of mesoscale ocean dynamics by producing highly accurate sea surface height (SSH) measurements. For a large number of applications, one-dimensional SSH data must be interpolated onto two-dimensional gridded maps regular in space and time. Today, these maps are generated at a daily frequency at $1/4^\circ$ resolution by an optimal interpolation algorithm operationally implemented within the DUACS system. However, the spatial resolution of these maps, mainly limited by nadir altimetry sampling, does not allow to properly observe sub-mesoscale structures, which are known to be essential for understanding, modeling and forecasting the climate system. The new Surface Water Ocean Topography (SWOT) wide swath altimetry mission will be launched in late 2022. SWOT will allow the observation of processes on spatial scales of 15-30 km. However, the linear interpolation algorithm currently implemented in the DUACS system needs to be improved to account for the non-linear dynamics of fast sub-mesoscale structures. In addition, it will be necessary to distinguish motions around geostrophic balance from those of internal tides to properly study the associated dynamics.

In this thesis, we explored the ability of the SWOT mission to meet its scientific objectives by developing innovative tools to map SSH at high resolution while separating balanced and internal tide dynamics. To do so, the strategy has been to include the ocean dynamics in the SSH mapping tools in the form of data assimilation with simple physical models adapted to each dynamics.

The first step of the PhD work was to apply the Back-and-Forth-Nudging (BFN) method along with a one-and-a-half layer Quasi-Geostrophic model (the so-called BFN-QG method) to map the balanced dynamics of the SSH. This technique is tested with both simulated and real observations. The results show that BFN-QG substantially reduces mapping errors compared to DUACS and this reduction is amplified when SWOT is added to the nadir altimeter constellation. Also, the BFN-QG method can be adapted to combine large-scale corrections from nadir data and small-scale corrections from SWOT data so as to reduce the impact of SWOT correlated noises and still provide accurate SSH maps. However, the performance of BFN-QG applied to real nadir observations is reduced in low energy regions.

In a second step, we focused on the issue of separating balanced and internal tides dynamics from SWOT data. In particular, we developed a 4Dvar technique to assimilate SSH observations into a linear Shallow-Water model to estimate the internal tidal dynamics (the so-called 4Dvar-SW method). A key strength of the 4Dvar-SW is its ability to estimate the non-stationary internal tide. Two separation strategies are presented. The first implements an alternating minimization algorithm that iteratively combines BFN-QG and 4Dvar-SW methods. Although tested in an idealized experimental set-up, this technique seems promising for mapping and separating the contributions of the two dynamics. The results also indicate that the temporal sampling of the observations is crucial to correctly estimate the internal tidal dynamics, and by extension the balanced dynamics. The second strategy relies on the implementation of a global 4Dvar in reduced bases and an additive contribution of the two reduced models. This technique is tested in the realistic framework of the calibration and validation phase off the coast of California and the performances are once again promising, in particular for estimating non-stationary internal tides dynamics.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Dynamique océanique : gammes d'échelle et interactions	1
1.1.1	Circulation générale	1
1.1.2	Dynamique équilibrée de mésoéchelle	3
1.1.3	Dynamique équilibrée de sous-mésoéchelle	4
1.1.4	Dynamique ondulatoire	6
1.2	L'altimétrie pour l'étude de la dynamique océanique	7
1.2.1	Principe de mesure au nadir	9
1.2.2	Le système DUACS	11
1.2.3	Applications pour l'étude de la dynamique de mésoéchelle	14
1.2.4	Limitations pour l'étude de la dynamique de sous-mésoéchelle . .	18
1.3	La mission SWOT : enjeux et problématiques	19
1.3.1	Principe de mesure et déroulement de la mission	21
1.3.2	Cartographie haute résolution	23
1.3.3	Séparation ondes-tourbillons	25
1.3.4	Reconstruction de la circulation en profondeur	28
1.4	Motivations et stratégie du travail de thèse	29
1.4.1	Résumé de l'introduction	29
1.4.2	Approche et objectifs de la thèse	30
1.4.3	Plan du manuscrit	31
2	Approche méthodologique et outils numériques	33
2.1	Modèles dynamiques réduits	33
2.1.1	Équations simplifiées pour un océan peu profond	33
2.1.2	Approximations et équations pour la dynamique quasi-géostrophique	35
2.1.3	Approximations et équations pour la dynamique d'ondes internes .	37
2.2	Éléments d'assimilation de données	38
2.2.1	Vocabulaire et méthode de Nudging	39

2.2.2	Méthodes de lissage	40
2.2.3	Réduction d'ordre	44
2.3	Stratégies expérimentales	45
2.3.1	Observations synthétiques	45
2.3.2	Observations réelles	47
2.3.3	Métriques	48
3	Cartographie altimétrique haute résolution de la dynamique équilibrée dans le contexte de la mission SWOT	51
3.1	Résumé	51
3.2	Article 1 : Mapping Altimetry in the Forthcoming SWOT Era by Back-and-Forth Nudging a One-Layer Quasigeostrophic Model	52
3.3	Supplemental Material	67
3.3.1	Robustness to seasonal change	67
3.3.2	Robustness to geographical region change	68
3.3.3	The OSMOSIS region	68
4	Article 2 : Regional mapping of energetic short mesoscale ocean dynamics from altimetry : performances from real observations.	79
4.1	Introduction	81
4.2	The BFN-QG algorithm	82
4.2.1	The QG dynamics	82
4.2.2	Formulation with Sea Level Anomalies	82
4.2.3	Data assimilation	83
4.3	Experimental set-up	84
4.3.1	Study area and input data	84
4.3.2	Mean geostrophic current	85
4.3.3	Performances assessment strategies	85
4.4	SLA-mapping performances	86
4.5	U-mapping performances	88
4.6	Discussion and conclusions	90
5	Article 3 : Joint Estimation of Balanced Motions and Internal Tides From Future Wide-Swath Altimetry.	93
6	Vers la cartographie simultanée des dynamiques équilibrée et de marée interne à partir des données SWOT	113

6.1	Introduction	113
6.2	Contexte expérimental réaliste	114
6.3	Limites de la méthode de minimisation alternée	117
6.4	Implémentation d'une méthode de minimisation simultanée	120
6.4.1	Modèles dynamiques	120
6.4.2	4Dvar	121
6.4.3	Réduction d'ordre	121
6.5	Application	124
6.5.1	Configuration de l'assimilation	124
6.5.2	Diagnostics	125
6.5.3	Résultats	125
6.6	Conclusions	126
7	Conclusion	131
7.1	Synthèse	131
7.1.1	Contexte scientifique	131
7.1.2	Méthodes	132
7.1.3	Résultats	133
7.2	Perspectives	133
7.2.1	Traitemennt des erreurs SWOT	133
7.2.2	Cartographie globale de SSH	134
7.2.3	Assimilation multi-capteurs	135
7.2.4	Reconstruction verticale	137
Bibliographie		139
Annexe A	Rapport de stage de Francisco Amaral	149
Annexe B	Rapport de stage d'Eneko Martinez	171

Chapitre 1

Introduction

1.1 Dynamique océanique : gammes d'échelle et interactions

1.1.1 Circulation générale

L'océan influence le climat global en absorbant de l'énergie solaire et en échangeant de la chaleur avec l'atmosphère. Du fait de son étendue remarquable – 70% de la surface planétaire – et de sa capacité thermique, il peut stocker une capacité de chaleur environ mille fois supérieure à celle de l'atmosphère. L'océan contribue largement à atténuer les effets à court terme du changement climatique en absorbant plus de 90 % de la chaleur accumulée dans l'atmosphère du fait de l'augmentation de l'effet de serre et en captant près du quart des émissions de gaz carbonique liées aux activités humaines.

La circulation océanique joue un rôle essentiel dans le système climatique car elle permet de redistribuer la chaleur absorbée sur l'ensemble du globe. Les eaux de surface chaudes et salées des tropiques sont transportées vers les pôles, cédant une partie de leur énergie à l'atmosphère aux moyennes latitudes. On estime que l'océan contribue à près de la moitié du transport méridien de chaleur à l'échelle globale, l'autre moitié étant assurée par l'atmosphère (Hastenrath, 1982). À la surface des océans, le transport méridien est principalement assuré par les courants de bord ouest, comme le Gulfstream dans l'atlantique nord et le Kuroshio dans le pacifique, là où s'échangent d'importantes quantités de chaleur avec l'atmosphère (Kwon et al., 2010). En se refroidissant, les eaux salées (donc denses) provenant des tropiques retournent vers l'équateur sous forme de courants profonds. Ensuite, ces eaux sont mélangées aux couches superficielles tropicales, permettant la remontée à la surface de nutriments essentiels à la vie marine. Cette circulation, appelée circulation méridienne de retournement

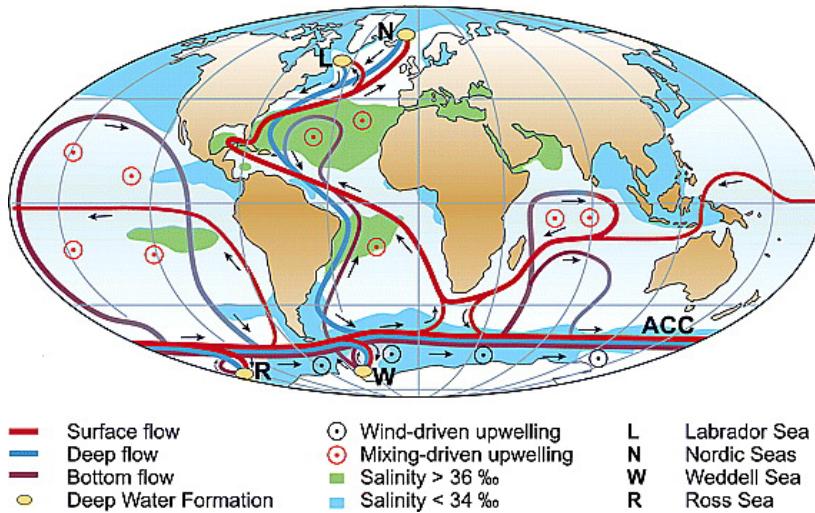


FIGURE 1.1 Schéma de la circulation océanique à grande échelle mettant en évidence la MOC. En rouge, les courants de surface ; en bleu, les courants profonds. Cette figure est tirée de Kuhlbrodt et al. (2007).

(ou MOC, pour *Meridional Overturning Circulation*; Figure 1.1), régit notre climat de manière globale (Lynch-Stieglitz, 2017).

Dans la couche superficielle de l'océan, la circulation (et donc le transport de chaleur associé) est principalement forcée par les vents. Cette circulation de grande échelle, quasi horizontale, est correctement décrite par l'approximation géostrophique qui suppose un équilibre entre la force de Coriolis et les gradients horizontaux de pression. De plus, la couche superficielle de l'océan est soumise au transport d'Ekman, qui induit une déviation des courants par rapport à la trajectoire des vents vers la droite (gauche) dans l'hémisphère nord (sud). Par conséquent, la variation de la force de Coriolis avec la latitude et la distribution spatiale des vents à grande échelle (vents d'ouest aux hautes latitudes, alizés aux basses latitudes) expliquent les trajectoires des principaux courants océaniques de surface (Munk, 1950).

La compréhension des mécanismes régissant la circulation océanique de grande échelle et sa prévision dans un climat changeant nécessite l'étude de la dynamique de l'océan sur une large gamme d'échelles spatio-temporelles. En effet, l'énergie injectée à la surface doit être restituée ou dissipée pour assurer l'équilibre énergétique de la planète. Les mécanismes assurant cet équilibre sont régis par une grande variété de processus qui interagissent entre eux. De plus, seulement 10% de l'énergie apportée par les vents est dissipée dans la couche superficielle de l'océan (Ferrari and Wunsch, 2009), la majeure partie étant transférée aux couches inférieures. Les processus physiques qui mènent à la dissipation de l'énergie apportée par le forçage atmosphérique connectent alors l'océan de surface et l'océan profond.



FIGURE 1.2 Image synthétisée à partir des radiances mesurées par le radiomètre MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) le 23 décembre 2004 au large de la Tasmanie. L'échelle de couleur n'est pas représentative de la réalité. Les deux gros tourbillons de mésoéchelle visibles sur cette image ont des diamètre d'environ 100 km. Crédits : <http://oceancolor.gsfc.nasa.gov>

1.1.2 Dynamique équilibrée de mésoéchelle

Notre compréhension de la dynamique océanique a évolué au cours des dernières décennies en réalisant l'importance du rôle joué par les tourbillons et les méandres de mésoéchelle dans l'océan (figure 1.2). Dans ce manuscrit, la mésoéchelle désigne les structures océaniques caractérisées par des échelles spatiales de 50 km à 1000 km évoluant sur des échelles temporelles de plusieurs semaines (Wunsch and Stammer, 1998). Les structures de mésoéchelle ont été observées dès les années 1970s grâce notamment au projet *The Mid-Ocean Dynamics Experiment* (MOD, 1978). Les tourbillons de mésoéchelle sont principalement produits par instabilité barocline du courant moyen de grande échelle (Pierrehumbert and Swanson, 1995). C'est pourquoi on les observe surtout dans les zones de forte énergie, comme au voisinage des grands courants de bord ouest.

Les structures de mésoéchelle sont très proches de l'équilibre géostrophique. L'évolution spatio-temporelle de ces structures est correctement décrite par les modèles quasi-géostrophiques (QG) aux moyennes latitudes (Vallis, 2006). L'échelle caractéristique des tourbillons est donnée par le rayon de déformation interne de Rossby, qui représente la longueur en dessous de laquelle les effets de la stratification dominent la force de Coriolis sur la dynamique. Ce rayon de Rossby varie géographiquement, de quelques centaines de kilomètres à l'équateur, à quelques kilomètres aux pôles ou en zone peu profonde (comme au voisinage des côtes).

Les structures de mésoéchelle sont le principal réservoir d'énergie cinétique dans l'océan (Stammer, 1997). Elles participent grandement au transport latéral de chaleur (Griffies et al., 2015) et de masse (Treguier et al., 2014) à travers le globe. Elles transfèrent l'énergie des petites aux grandes échelles sous la forme d'une cascade inverse d'énergie qui modifie ainsi l'écoulement spatial de grande échelle (Holland, 1978) et aussi sa variabilité temporelle (Thomas and Zhai, 2013).

1.1.3 Dynamique équilibrée de sous-mésoéchelle

L'interaction non linéaire entre des structures de mésoéchelle donne lieu à de forts étirements des masses d'eau qui vont générer de nouvelles structures à des échelles plus petites, dites de sous-mésoéchelle (McWilliams, 2016; McWilliams et al., 2009). Dans ce manuscrit, la sous-mésoéchelle désigne les structures océaniques caractérisées par des échelles spatiales de 1 km à 50 km évoluant sur des échelles temporelles de quelques jours. Comme illustrées sur la figure 1.3, ces structures peuvent prendre la forme de petits tourbillons, de filaments (extrême de densité) ou de fronts (gradients intense de densité).

Les structures de sous-mésoéchelle sont supposées être en équilibre géostrophique partiel car l'équilibre entre les forces de Coriolis et de pression est modifié par une contribution plus importante des gradients de densité en surface. En ce sens, les structures de sous-mésoéchelle sont confinées en surface tandis que les structures de mésoéchelle ont une signature plus profonde. Intensifiée en surface, la dynamique de sous-mésoéchelle est caractérisée par de fortes vitesses verticales (à l'inverse des courants de mésoéchelle qui sont principalement horizontaux). Les processus physiques mis en jeu par ces structures de sous-mésoéchelle sont correctement décrits par la théorie SQG (pour *surface Quasi-Geostrophy*) qui tient compte de l'advection des anomalies de densité en surface (Lapeyre and Klein, 2006).

Les structures de sous-mésoéchelle influencent fortement la dynamique à plus grande échelle. Elles contribuent au maintien et à la génération de structures de mésoéchelle (Sasaki et al., 2014). De récentes études numériques ont montré que la circulation de sous-mésoéchelle subit une forte variabilité saisonnière, marquée par une intensification en hiver

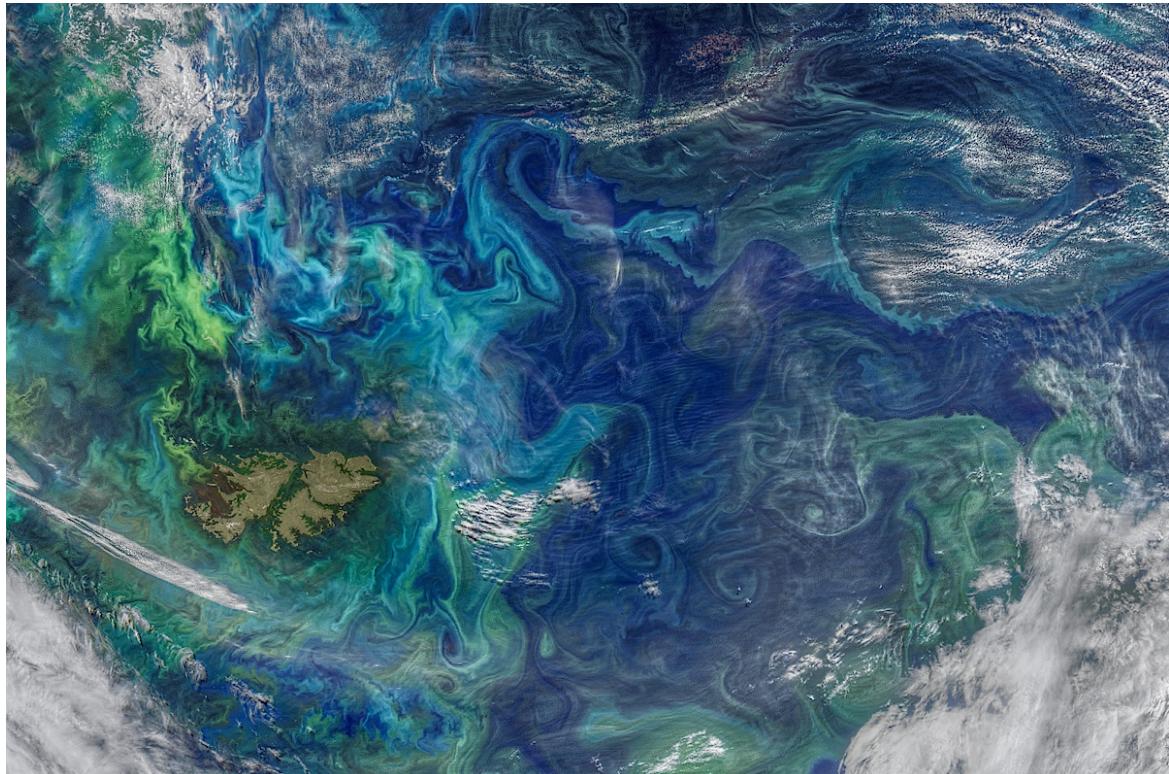


FIGURE 1.3 Image de la couleur de l'océan prise lors de la campagne de mesure aérienne S-MODE (<http://smode.whoi.edu/>) montrant des efflorescences planctoniques le long de structures filamenteuses de sous-mésoéchelle le 5 janvier 2021 au sud de l'océan Atlantique.

(Qiu et al., 2014; Sasaki et al., 2014). Cette intensification hivernale de la dynamique de sous-mésoéchelle crée une intensification de la dynamique de mésoéchelle au printemps et/ou à l'été (Schubert et al., 2020). À l'échelle climatique, la circulation verticale de sous-mésoéchelle impacte la convection profonde des eaux de hautes latitudes, modifiant alors la MOC (Chassignet and Xu, 2017).

La prise en compte de la dynamique de sous-mésoéchelle est essentielle pour améliorer la précision des prévisions climatiques. En effet, les fortes vitesses verticales mises en jeu par les structures de sous-mésoéchelle dominent les échanges de chaleur avec l'atmosphère. Une étude récente de Su et al. (2018) indique que la circulation de sous-mésoéchelle produit un flux vertical de chaleur 5 à 10 fois supérieur à celle de mésoéchelle, impactant alors grandement le bilan énergétique global. Cependant, Richards et al. (2021) ont constaté qu'un réchauffement de l'océan supérieur, dans le contexte du dérèglement climatique, contribuerait à une diminution significative de l'activité de sous-mésoéchelle et donc à une réduction du flux vertical de chaleur associé. En plus des flux verticaux de chaleur, les structures de sous-mésoéchelle participeraient majoritairement à la captation de carbone dans l'atmosphère (Lévy et al., 2012). Une décroissance de cette activité accentuerait donc d'autant plus le réchauffement global.

1.1.4 Dynamique ondulatoire

En plus de la dynamiques équilibrée de mésoéchelle et de sous-mésoéchelle, l'océan de surface est l'hôte d'une dynamique ondulatoire. En particulier, aux échelles spatiales inférieures à 300 km, la dynamique ondulatoire met en jeu des processus appelés ondes internes de gravité (figure 1.4) qui évoluent sur des échelles temporelles de quelques heures. Ces ondes génèrent des perturbations de courant et de densité qui peuvent se propager sur des milliers de kilomètres. Alors que leurs amplitudes peuvent atteindre la centaine de mètres à l'intérieur de l'océan, ces ondes ont une signature à la surface de seulement quelques centimètres. À la différence des structures équilibrées de mésoéchelle et sous-mésoéchelle, les ondes internes sont caractérisées par une propagation rapide et principalement gouvernées par une dynamique linéaire.

Les ondes internes sont générées par une variété de processus physiques à l'intérieur ou à la surface des océans. À l'intérieur des océans, elles sont générées lorsque les masses d'eau rencontrent des variations abruptes de la topographie. Le courant de marée barotrope, forcé par l'action gravitationnelle de la lune et du soleil, est le principal moteur de génération d'ondes internes en profondeur. On parle alors d'ondes de marée interne (*Internal Tides*; Garrett and Kunze (2007)). Comme la marée barotrope, ces ondes de marée interne oscillent

à des fréquences fixes (diurnales et semi-diurnales). Les courants géostrophiques profonds peuvent aussi générer des ondes internes en profondeur.

Les ondes internes sont une composante essentielle du système climatique. Elles participent grandement au mélange océanique nécessaire au maintien de la stratification océanique en transférant l'énergie des grandes aux petites échelles (Polzin and Lvov, 2011). En fait, ce mélange dû aux ondes internes est bien plus efficace pour maintenir la MOC que le sont les flux convectifs d'eau douce et froide aux hautes latitudes (Wunsch and Ferrari, 2004).

Les ondes internes interagissent avec les structures équilibrées de mésoéchelle et sous-mésoéchelle et ces interactions modulent les dynamiques des deux classes de mouvement. Les tourbillons de mésoéchelle impactent la propagation des ondes internes en modifiant leur direction et leur vitesse (Danioux et al., 2008). Cette interaction s'accompagne d'un transfert d'énergie de la dynamique de mésoéchelle vers la dynamique ondulatoire, impactant ainsi le mélange océanique localement (Whitt and Thomas, 2015). Cette énergie ainsi transférée peut stimuler, par la suite, la génération de structures de sous-mésoéchelle, intensifiant alors les vitesses verticales associées (Rocha et al., 2018). Il semble donc que les ondes internes agissent comme un vecteur de transfert d'énergie de la dynamique de mésoéchelle à la dynamique de sous-mésoéchelle, menant alors vers la dispersion de l'énergie reçue aux grandes échelles (Thomas and Daniel, 2021).

1.2 L'altimétrie pour l'étude de la dynamique océanique

L'altimétrie spatiale a révolutionné notre compréhension de la dynamique océanique en permettant des mesures précises du niveau de la mer (SSH pour *Sea Surface Height*) sur une grande partie du globe (Stammer and Cazenave, 2017). Les structures de mésoéchelle ainsi qu'une partie des ondes décrites dans la section précédente sont observables à partir de la mesure de SSH. De plus, la connaissance de la SSH permet de déduire les courants géostrophiques de surface et donc la circulation de grande échelle (voir section 1.2.3). De plus, la SSH donne une vue intégrée de la structure océanique en profondeur, ce qui permet l'étude d'une multitude de processus géophysiques.

Depuis le premier altimètre SEASAT lancé en 1978, la qualité des mesures altimétriques n'a cessé d'être améliorée. C'est en 1992, avec le lancement du satellite Topex/Poseidon développé conjointement par le CNES et la NASA, que l'altimétrie spatiale a réellement révolutionné le domaine de l'océanographie. Le satellite a fourni des données de grande précision sans précédent – quelques centimètres contre quelques dizaines de centimètres pour les précédents – ce qui a permis d'augmenter considérablement le rapport signal/bruit et par conséquent la précision des observations de la dynamique océanique et sa variabilité.

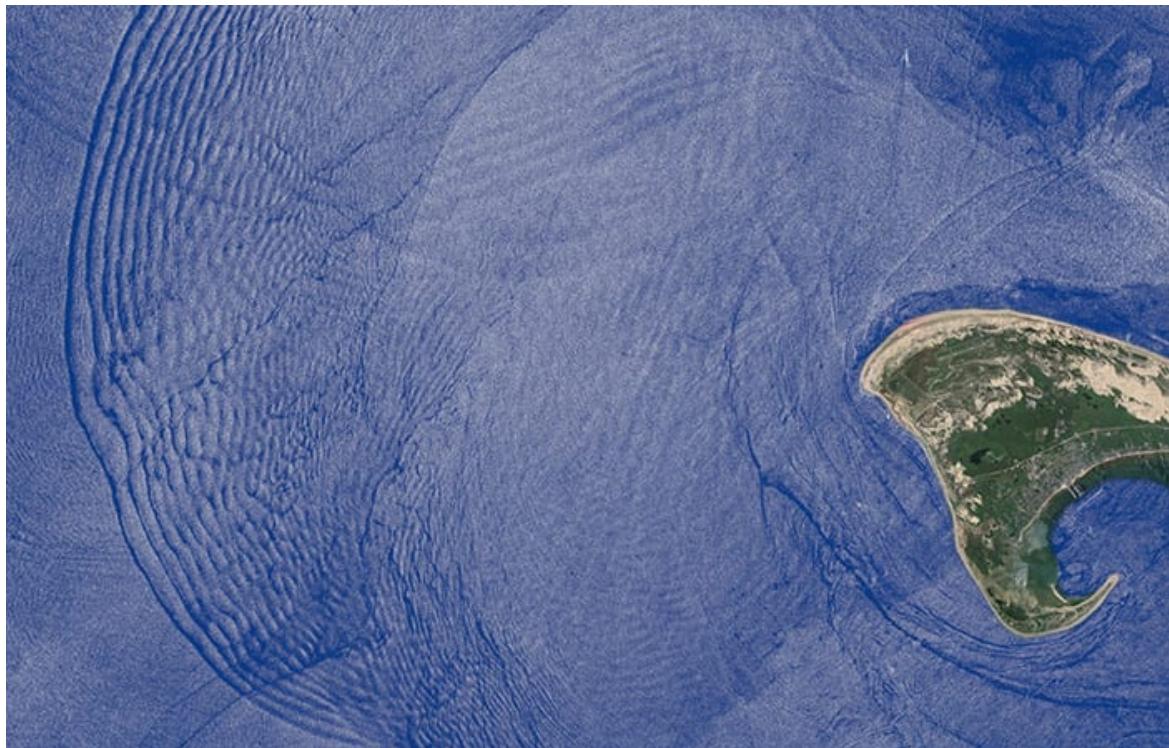


FIGURE 1.4 Image fournie par le satellite allemand TerraSAR-X montrant des bandes sombres et claires alternées d'eaux lisses et rugueuses formées à la surface de l'océan par une onde interne se propageant dans les profondeurs dans la baie de Cape Cod sur la côte est des Etats-Unis.

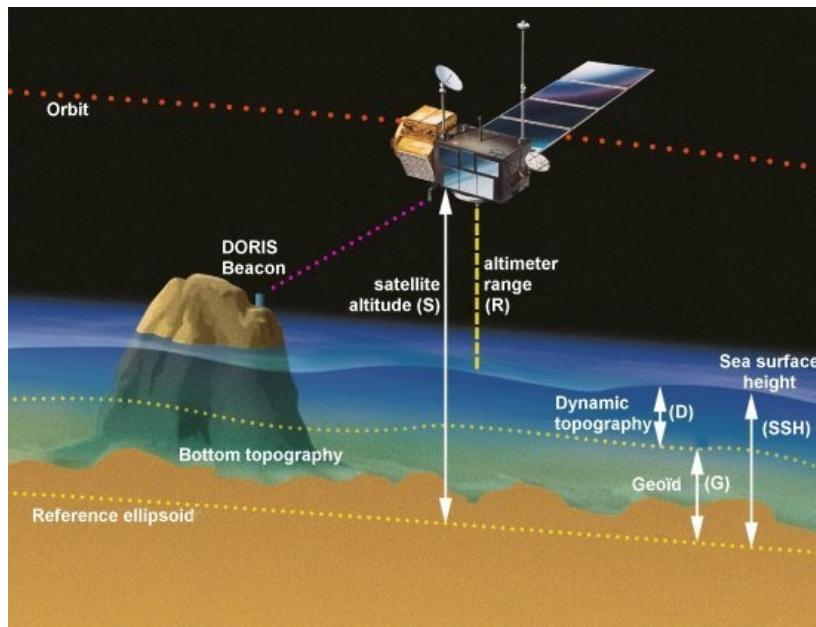


FIGURE 1.5 Principe de mesure de la SSH par altimétrie. Crédits : AVISO (www.aviso.altimetry.fr).

Les vols simultanés de plusieurs altimètres ont permis de cartographier la SSH, de manière quasi-globale, sur une grille régulière en espace et en temps, révélant la variabilité spatio-temporelle de la dynamique de mésoscale. Depuis, la technologie instrumentale accompagnée des chaînes de traitement (calibration, validation, cartographie) n'ont cessé d'être améliorées, permettant une caractérisation toujours plus précise de la circulation de mésoscale à travers le globe.

1.2.1 Principe de mesure au nadir

Le fonctionnement d'un altimètre pour mesurer la SSH est conceptuellement simple (figure 1.5). Un radar émet une impulsion à la verticale descendante du satellite (au nadir). Une partie du signal est réfléchie par la surface de l'océan et est réceptionnée par le satellite. La vitesse de l'onde se propageant à la vitesse de la lumière, la mesure de la durée entre l'émission et la réception permet de déduire la distance séparant le satellite et la surface de l'océan. Cette distance est classiquement appelée R (pour *range*). De plus, un système de positionnement embarqué (récepteur GPS ou DORIS) à bord du satellite permet de déterminer avec précision l'altitude du satellite S par rapport à un ellipsoïde de référence. La SSH est alors déduite en soustrayant ces deux quantités : $SSH = S - R$.

En pratique, seulement la partie dynamique de la SSH, appelée topographie dynamique (ou ADT pour *Absolute Dynamic Topography*), est exploitée pour les études océanogra-

phiques. L'autre partie représente la hauteur du géoïde G (surface équipotentielle de gravité) qui reflète la répartition volumique de la masse de la Terre. Cependant, G n'est pas connue avec suffisamment de précision pour extraire directement l'ADT de la mesure de SSH. Considérant G stationnaire, on peut s'affranchir de sa connaissance en relevant la partie variable de la SSH, appelée SLA (pour *Sea Level Anomaly*). Pour cela, la moyenne temporelle de la SSH, appelée MSSH (pour *Mean Sea Surface Height*), est retranchée au signal mesuré. La MSSH est calculée à partir des séries temporelles de SSH pour des satellites qui ont des trajectoires répétitives ou à partir de produits cartographiés pour les autres satellites. En revanche, cette opération supprime aussi la topographie dynamique moyenne (ou MDT pour *Mean Dynamic Topography*), qui reflète la circulation moyenne. Elle peut être calculée en combinant des données altimétriques, géodésiques et *in-situ* (Mulet et al., 2021). Pour résumer, les différentes quantités (illustrées sur la Figure 1.5) sont liées comme ceci :

$$SLA = SSH - MSSH = SSH - G - MDT = ADT - MDT \quad (1.1)$$

Dans la suite du manuscrit, nous ne parlerons plus de MSSH et de G et le terme SSH désignera seulement la partie dynamique du signal total (i.e. l'ADT ; cet abus de langage est classiquement employé dans la communauté d'océanographie physique).

On distingue deux grandes catégories de capteur : LRM (pour *Low Resolution Mode*) et SAR (pour *Synthetique Aperture Radar*). La technologie LRM moyenne des impulsions radar individuelles sur des empruntes circulaires de rayon de l'ordre de 5-10km. Parmi les missions LRM, on distingue les missions dites de référence (T/P, Jason-1,2,3) qui sont conçues pour avoir des mesures très précises de la SSH à grande échelle permettant ainsi la mesure de signaux climatiques. Les autres satellites LRM (ERS, Envisat, SARAL/AltiKa) sont alors conçus pour fournir un échantillonnage complémentaire à celui des missions de référence pour améliorer la couverture de la constellation. La technologie SAR (embarquée sur les satellites CryoSat-2, Sentinel-3 et Sentinel-6), quant à elle, analyse simultanément des groupes d'impulsions radar et exploite l'effet Doppler induit par le déplacement du satellite pour réduire considérablement l'emprunte au sol le long de la trace.

La mesure de SSH est polluée par plusieurs sources d'erreurs qui doivent être corrigées pour garantir une précision maximale de la mesure. Ces erreurs sont liées à la réfraction de l'onde radar par l'atmosphère (Chelton et al., 2001) ; à la dispersion de l'onde par les vagues à la surface de l'océan (Gaspar et al., 1994) ; au positionnement du satellite sur son orbite ; à la détermination de la MSSH (Pujol et al., 2018). Notons que les erreurs liées aux vagues sont d'autant plus importantes que l'empreinte du signal altimétrique à la surface de l'océan est grande.

Même après correction des erreurs susmentionnées, le signal altimétrique est caractérisé par un bruit résiduel qui limite les échelles spatiales observables sur les traces (Dufau et al., 2016). Ce bruit est visible sur les spectres spatiaux des données altimétriques. Un spectre spatial traduit la distribution d'énergie contenue dans un signal (ici la SSH) en fonction des longueurs d'onde qui le composent. Pour la dynamique de mésoéchelle, les grandes longueurs d'onde sont plus énergétiques que les petites longueurs d'onde (ceci se traduit par une courbe spectrale décroissante ; figure 1.6). Par conséquent, le bruit résiduel (dont l'énergie est constante pour toutes les longueurs d'onde) est d'autant plus important que les longueurs d'onde du signal sont petites. Ceci se traduit par un aplatissement de la courbe spectrale aux petites échelles (figure 1.6). Par convention, on définit la résolution spatiale des données altimétriques par la longueur d'onde pour laquelle le rapport signal/bruit est supérieur à 1. En moyenne, cette résolution est de 70-80km pour Jason-2 (LRM), 40-50km pour SARAL/Altika (LRM), 30-50km pour Sentinel-3 (SAR). Par ailleurs, le bruit altimétrique est très sensible aux conditions locales de l'océan et de l'atmosphère (par exemple la hauteur des vagues et l'intensité des pluies), ce qui implique une variation spatio-temporelle de son intensité, avec une intensification en hiver et proche des régions de haute variabilité, affectant ainsi la distribution spatio-temporelle des échelles résolues sur les traces (Vergara et al. (2018) ; figure 1.6). Comme le montre la partie droite de la figure 1.6, les variations géographiques du niveau de bruit et de la résolution spatiale ne sont pas forcément corrélées car cette dernière dépend aussi du régime dynamique local. Enfin, notons bien que ces échelles résolues ne concernent que la direction le long de la trace des satellites. Pour observer des structures en deux dimensions (2D), les données de SSH, réparties sur des traces en une dimension (1D), doivent être fusionnées et cartographiées sur une grille régulière en espace. Ceci est l'objet du paragraphe suivant.

1.2.2 Le système DUACS

Une grande partie des applications des données altimétriques (voir section 1.2.3 pour quelques exemples) requièrent l'utilisation de cartes 2D de SSH. Par exemple, les courants géostrophiques en surface s'obtiennent en dérivant la SSH dans les deux dimensions de l'espace. Ces cartes sont obtenues en combinant les observations de différents satellites. Les données sur les traces 1D sont interpolées ou extrapolées aux régions non observées. La chaîne de traitement menant à la génération de ces cartes est assurée par le système DUACS (*Delevoping Use of Altimetry for Climate Studies*), dont les produits étaient distribués historiquement par AVISO (*Archiving Validation and Interpretation of Satellite Oceanography*) et maintenant par le CMEMS (*Copernicus Marine and Environment Monitoring Service*). Au sein du système DUACS, les données sont dans un premier temps intercalibrées (on parle de

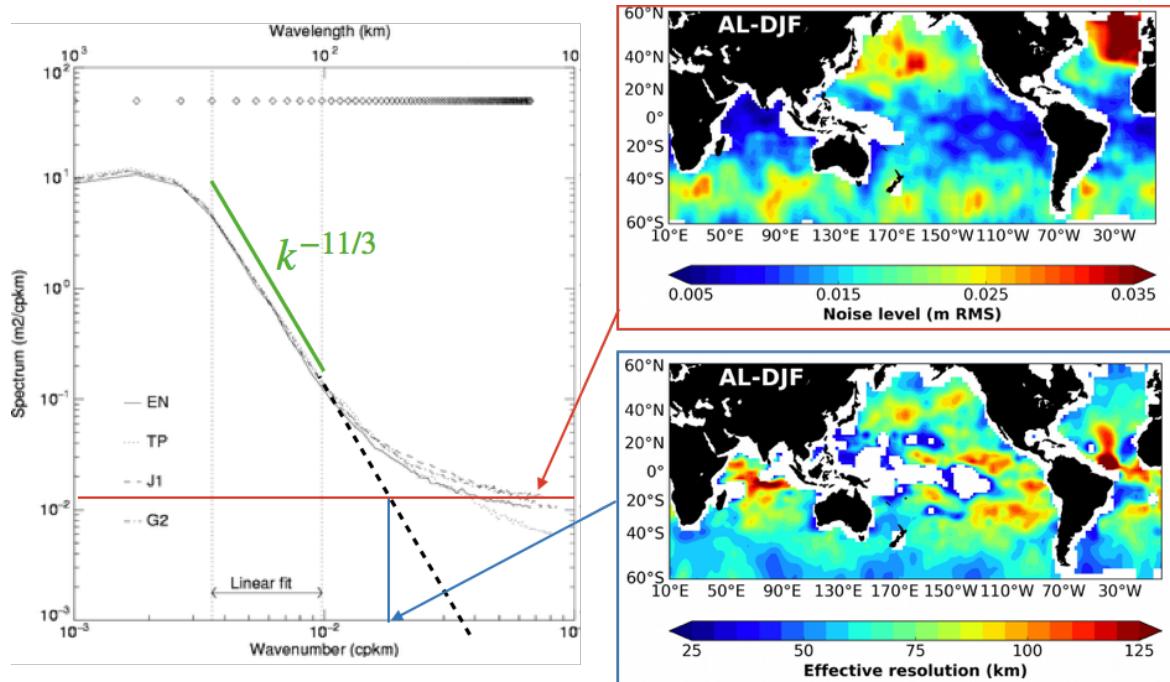


FIGURE 1.6

À gauche : spectres de l'énergie contenue dans les données altimétriques de quatre missions (EN pour Envisat, TP pour Topex/Poseidon, J1 pour Jason-1, G2 pour Geosat-2). Les spectres sont moyennés sur une année et dans la région du Gulfstream. La ligne verte représente la pente commune des spectres, calculée dans la gamme d'échelle 100-300km. Cette pente caractérise le régime dynamique local (voir section 1.2.3). La ligne rouge représente une estimation du niveau de bruit. L'intersection entre le prolongement de la partie linéaire du spectre (ligne pointillée noire) et le niveau de bruit détermine la résolution effective des données altimétriques. Cette figure est adaptée de Le Traon et al. (2008).

À droite : distributions spatiales à l'échelle globale du niveau de bruit (en haut) et de la résolution effective associée (en bas) caractéristiques de la mission SARAL/AltiKa. Figures tirées de Vergara et al. (2018).

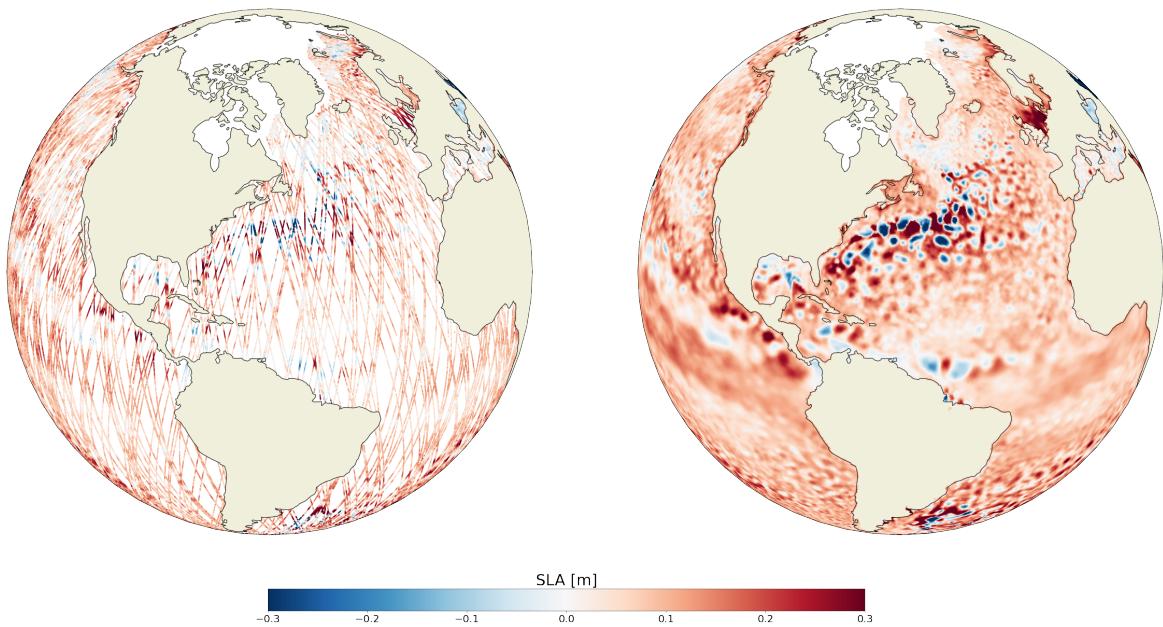


FIGURE 1.7 À gauche : SLA mesurée le long des traces de la constellation altimétrique opérationnelle entre les 7 et 13 janvier 2019. À droite : carte de SLA fournie par le système DUACS le 10 janvier 2019, révélant une grande variabilité de mésoéchelle aux alentours du Gulfstream.

produit L3), puis cartographiées quotidiennement sur une grille de résolution $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ à l'échelle globale (produit L4, figure 1.7).

Aujourd'hui, les cartes globales de SSH sont produites par une technique d'interpolation optimale (Ducet et al., 2000; Le Traon et al., 2003, 1998). Avant d'être interpolées, les données sont corrigées de certains signaux barotropes de haute fréquence (majoritairement générés par les marées océaniques et les variations de la pression atmosphérique) estimés par des modèles dédiés (Carrère and Lyard, 2003; Lyard et al., 2006). Ensuite, les données sont interpolées optimalement en prescrivant les covariances spatio-temporelles du signal à cartographier et les erreurs de mesure. La valeur de la SSH sur un point donné de grille est estimée en combinant les observations contenues dans une boule spatio-temporelle autour de ce point. Les dimensions de cette boule sont prescrites pour inclure les échelles typiques de variabilité du signal à cartographier tout en englobant un nombre suffisant d'observations. Ces échelles varient géographiquement et sont régulièrement affinées en analysant l'historique des données altimétriques (Pujol et al., 2016; Taburet et al., 2019). Dans DUACS, ces échelles sont choisies de façon à estimer des structures globalement cohérentes dans le temps et dans l'espace, en limitant au maximum les hétérogénéités liées à l'irrégularité des traces altimétriques (Dibarbour et al., 2011).

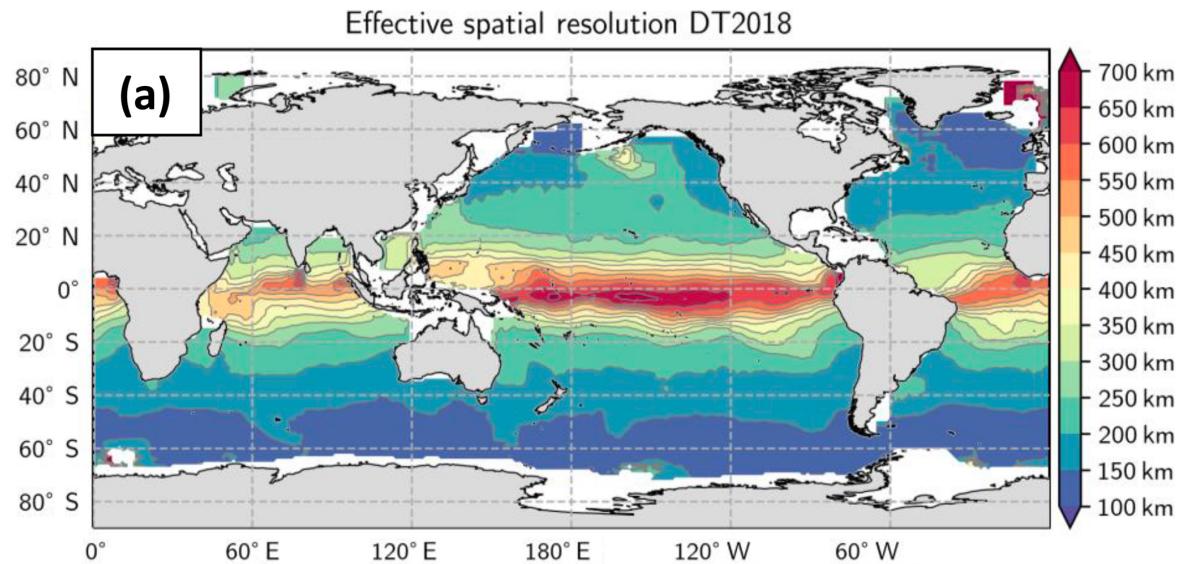


FIGURE 1.8 Résolution effective (en km) des cartes DUACS (figure tirée de Ballarotta et al. (2019))

Ces cartes de SSH permettent de résoudre des processus de mésoéchelle >200km aux moyennes latitudes, les échelles plus petites étant filtrées par la procédure d'interpolation. Ballarotta et al. (2019) ont estimé la distribution géographique de la résolution effective de ces cartes. Cette résolution effective est calculée en utilisant un satellite indépendant (i.e. n'intervenant pas dans la procédure d'interpolation) et est définie comme l'échelle spatiale en dessous de laquelle l'erreur commise par l'interpolation optimale est supérieure à la moitié de la variance du signal indépendant observé. La figure 1.8 montre que la résolution effective des cartes DUACS varie de 800km aux tropiques à 100km aux pôles. Cette résolution est majoritairement limitée par l'échantillonnage spatio-temporel de la constellation altimétrique.

1.2.3 Applications pour l'étude de la dynamique de mésoéchelle

L'étude des processus de mésoéchelle par l'altimétrie est grandement facilitée par la validité de l'équilibre géostrophique à cette gamme d'échelle. En plus de la signature en SSH qui concerne des échelles spatiales résolues par l'altimétrie d'aujourd'hui, la circulation de mésoéchelle s'obtient aisément à partir des cartes 2D de SSH. Les courants géostrophiques sont parallèles aux lignes de niveau de la SSH et leur norme est égale au gradient spatial de la SSH au point considéré. Cependant, l'équilibre géostrophique cesse d'être valide autour des latitudes équatoriales, là où les effets de la rotation de la Terre deviennent faibles. La figure 1.9 illustre un exemple de carte de la norme des courants géostrophiques calculée à partir d'une carte de SSH fournie par le système DUACS.

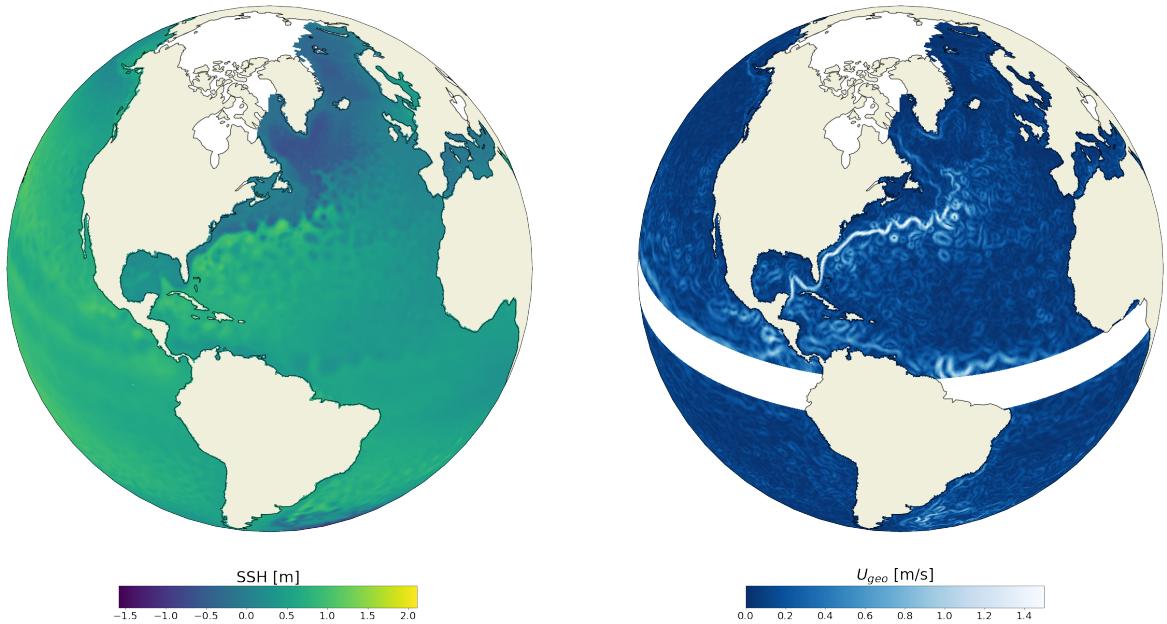


FIGURE 1.9 À gauche : carte de SSH obtenue en additionnant la carte de SLA de la figure 1.7 et la MDT (voir équation 1.1). À droite : carte des courants géostrophiques obtenue à partir de la SSH, en ignorant la bande équatoriale, révélant le courant du Gulfstream, ses méandres et ses tourbillons de mésoscale.

Certaines applications utilisent directement la donnée brute le long des traces altimétriques. En particulier, l'étude des spectres d'énergie le long des traces (figure 1.6) permet d'établir le régime de turbulence océanique sur des échelles spatio-temporelles non accessibles par la plupart des autres observations océaniques. En particulier, les pentes des spectres observés (par exemple la ligne rouge sur la figure 1.6) peuvent être confrontées aux valeurs des pentes prédictes par les différentes théories physiques. Selon la théorie QG, le spectre spatial de SSH devrait suivre une loi linéaire de pente -5. Xu and Fu (2012) ont montré que les spectres altimétriques diffèrent de l'approximation QG de manière plus ou moins marquée selon les régions du globe (Figure 1.10). Dans les régions énergétiques (par exemple au niveau du Gulfstream), les spectres semblent plutôt en accord avec la dynamique SQG (pente de $-11/3$) qui se caractérise par une activité de sous-mésoscale plus intense que la dynamique QG. Dans les régions de faible variabilité (régions tropicales ou à l'est des bassins océaniques), les spectres altimétriques révèlent des pentes spectrales très aplatis, incompatibles avec les théories QG ou SQG. Cette incompatibilité est probablement due à l'influence significative de processus non équilibrés, tels les ondes internes, sur la variabilité de la SSH aux petites échelles spatiales (typiquement $<100\text{km}$; Qiu et al. (2018); Rocha et al. (2016); Torres et al. (2018)).

Les cartes de SSH ont apporté une contribution unique à l'observation et à la compréhension de la variabilité de mésoéchelle. Il est maintenant évident que la plupart de la variabilité extratropicale à des longueurs d'onde de 100-500km est due à l'omniprésence de tourbillons non linéaires se propageant majoritairement vers l'ouest (Chelton et al., 2011). Un certain nombre de techniques ont été développées pour identifier les positions des tourbillons, estimer leurs amplitudes et leurs dimensions, et déterminer leurs trajectoires. La taille des tourbillons diminue de manière approximativement monotone d'environ 200km près de l'équateur à environ 75km à 60° de latitude. Ces échelles sont systématiquement plus grandes que les valeurs locales du rayon de Rossby, qui représente la taille théorique (dans le formalisme QG) des tourbillons. Ceci est cohérent avec l'idée que les tourbillons de mésoéchelle sont alimentés par des processus de sous-mésoéchelle à travers une cascade inverse de l'énergie, comme le prévoit la théorie SQG. Cependant, les processus de petites échelles qui génèrent ou dissipent ces grands tourbillons ne sont pas observables par l'altimétrie d'aujourd'hui.

Les courants géostrophiques déterminés à partir des cartes de SSH permettent d'étudier des propriétés dynamiques de fines échelles de l'océan de surface. En particulier, l'évolution temporelle des courants géostrophiques révèle un transport de particule complexe le long de structures filamentaires de fines échelles (Waugh and Abraham, 2008). Ces filaments sont étirés par les tourbillons de mésoéchelle et sont associés à de fortes vitesses verticales et/ou des forts gradients horizontaux de densité (McWilliams, 2016; Thomas et al., 2008). En calculant les trajectoires lagrangiennes à partir de séries temporelles de cartes altimétriques, Abernathey and Marshall (2013) ont pu estimer le taux de mélange induit par les tourbillons de mésoéchelle de manière globale. Par ailleurs, les courants géostrophiques peuvent être combinés à des mesures spatiales de température (SST, pour *Sea Surface Temperature*) et de salinité (SSS, pour *Sea Surface Salinity*) pour reconstruire l'évolution spatio-temporelle du transport de masse à fine échelle (Rogé et al., 2015).

La combinaison de données altimétriques avec d'autres données spatiales et/ou *in situ* informe sur les caractéristiques tri-dimensionnelles (3D) de la circulation océanique. La détection des tourbillons par altimétrie, combinée avec des mesures *in situ* de température et de salinité, permet d'estimer les transports latéraux de chaleur et de masse induits par les tourbillons de mésoéchelle (Dong et al., 2014). L'exploitation des corrélations entre les observations satellites à la surface (SSH et/ou SST) et les profiles verticaux de température et de salinité permet de cartographie la variabilité thermohaline 3D de mésoéchelle (Guinehut et al., 2012). En effet, la relative haute résolution des cartes de SSH permet de combler le sous-échantillonnage des mesures *in situ*. De cette variabilité thermohaline on peut déduire la circulation en profondeur grâce à des arguments dynamiques propres au formalisme QG (Buongiorno Nardelli, 2020; Mulet et al., 2012). Cependant, la résolution des cartes de SSH

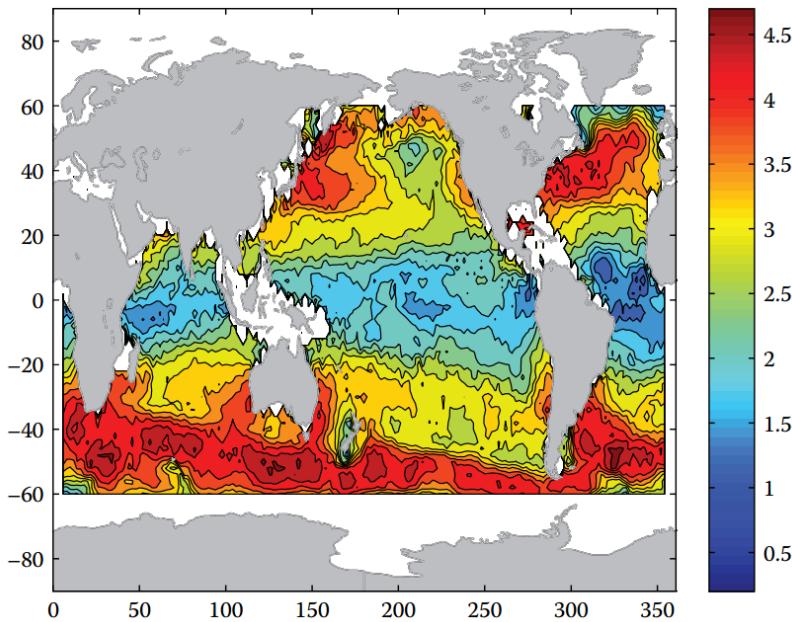


FIGURE 1.10 Distribution spatiale des pentes spectrales de SSH observées (figure tirée de Xu and Fu (2012)).

est aujourd’hui trop faible pour estimer la circulation verticale associée aux processus de sous-mésoéchelle.

L’historique des données altimétriques a permis l’estimation d’une part importante de la variabilité océanique due à la marée interne. Une analyse harmonique sur une série temporelle suffisamment longue (typiquement >10 ans) est utilisée pour cartographier l’amplitude et la phase du signal des ondes associées à chaque fréquence de marée (Zaron, 2019; Zhao et al., 2012). L’étude de ces cartes permet d’étudier les mécanismes de formation des ondes, leur trajectoire sur plusieurs milliers de km et leur organisation spatiale sous forme de faisceaux géométriques (Zhao et al., 2016, Figure 1.11). De plus, l’observation de la marée interne permet aussi de valider les modèles numériques simulant la génération et la propagation des ondes associées (Arbic et al., 2010). Trois raisons imposent la nécessité d’une série temporelle d’observation altimétrique suffisamment longue : (i) l’amplitude du signal de marée interne est du même ordre de grandeur que le niveau de bruit de mesure altimétrique (quelques centimètres), donc un grand nombre d’observations est nécessaire pour distinguer le signal utile du bruit altimétrique ; (ii) les périodes de revisite des satellites altimétriques (de l’ordre de dix jours pour les satellites de type Jason) sont bien supérieures aux périodes de marée (quelques heures) ce qui entraîne un aliasing des signaux d’ondes internes à haute fréquence dans une bande de fréquence beaucoup plus basse (quelques mois) ; et (iii) les fréquences de marée sont très proches les unes des autres, limitant ainsi leur séparabilité. Une conséquence

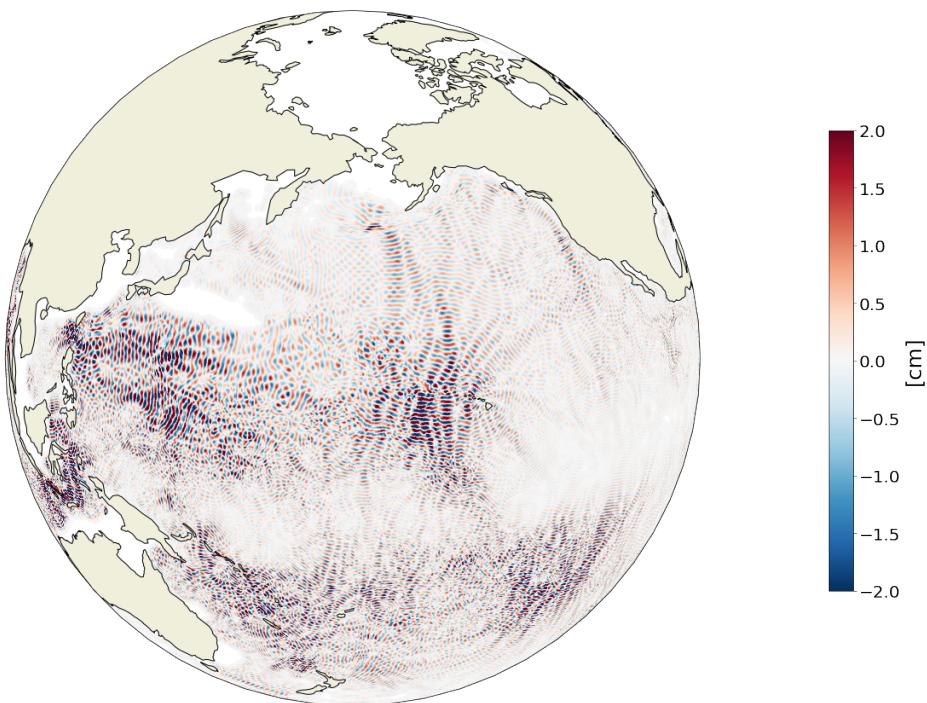


FIGURE 1.11 Signature de surface (en terme de SSH) de la marée interne stationnaire à la fréquence M_2 estimée par analyse harmonique de plus de 20 ans de données altimétriques suivant la méthode décrite par Zaron (2019).

immédiate de l'utilisation d'une analyse harmonique est que seule la partie cohérente (qui oscille exactement aux fréquences de marée) peut être extraite des données altimétriques. Or Zaron (2017) a estimé qu'une partie non négligeable (voire majoritaire à certain endroits du globe) est non-stationnaire. Cette non-stationnarité est produite majoritairement par l'interaction du champ d'onde avec la dynamique équilibrée (Ponte and Klein, 2015), et semble participer activement à la dissipation de l'énergie océanique. Cependant, de tels mécanismes n'ont jamais (à ce jour) été convenablement caractérisés par l'altimétrie nadir.

1.2.4 Limitations pour l'étude de la dynamique de sous-mésoéchelle

À la différence de la dynamique de mésoéchelle, la validité de l'approximation de l'équilibre géostrophique (qui permet de déduire les courants de surface à partir de la SSH) est moins évidente pour la dynamique de sous-mésoéchelle. Une étude récente de Yu et al. (2021) a utilisé un modèle à haute résolution simulant la dynamique de sous-mésoéchelle pour tester la validité de l'équilibre géostrophique. Les auteurs ont montré que les courants géostrophiques expliquent plus de 80% de l'énergie cinétique totale dans les régions énergétiques (au sein des grands courants de bord ouest, comme le Gulfstream).

En revanche, partout ailleurs dans l'océan, l'approximation de l'équilibre géostrophique ne conduit pas à des estimations précises des courants de sous-mésoéchelle. Plus précisément, l'écart à la géostrophie semble être principalement causé par la présence de mouvements non-équilibrés rapides tels les ondes internes (voir section 1.1.4 et 1.3.3).

Hormis la limitation intrinsèque des données altimétriques pour déduire les courants de sous-mésoéchelle, l'observation de la signature en SSH des structures de sous-mésoéchelle est grandement limitée par la résolution spatiale des cartes 2D de SSH. Ces cartes sous-estiment près de 60% de l'énergie cinétique observée aux longueurs d'onde comprises entre 65 et 200km (Pujol et al., 2016). Bien évidemment, la résolution des cartes s'améliore en augmentant le nombre d'altimètres dans la constellation. Pascual et al. (2007) ont montré qu'une constellation de quatre satellites permet d'estimer 15% d'énergie cinétique supplémentaire comparé à une constellation de deux satellites. Cependant, le gain relatif diminue plus on augmente le nombre d'altimètres dans la constellation. Il faudrait entre 10 et 15 satellites nadirs pour que les cartes de SSH puissent permettre d'observer des structures de l'ordre de 50km de longueur d'onde.

Plusieurs nouvelles stratégies d'interpolation ont été développées pour mieux exploiter le contenu de fine échelle contenu dans les données altimétrique 1D. Par exemple, Dussurget et al. (2011) ont proposé une interpolation qui utilise les covariances de DUACS comme première estimation et ajoute un incrément basé sur des covariances plus fines pour maintenir les fines échelles le long des trajectoires. Cette technique a par la suite été améliorée par Escudier et al. (2013) en prenant en compte la bathymétrie pour représenter l'anisotropie de l'écoulement près des côtes. Les champs 2D de SSH donnent des niveaux d'énergie cinétique 25% plus élevés que les produits DUACS standard. Cependant, l'énergie de fine échelle apportée par cette méthode reste confinée proche des traces altimétriques et n'est donc pas consistante dans le temps. Une autre stratégie pour mieux exploiter la corrélation temporelle des signaux de fine échelle est d'ajouter une contrainte dynamique dans le processus d'interpolation (Ubelmann et al., 2015). Cette stratégie sera développée en détail à la section 1.3.2.

1.3 La mission SWOT : enjeux et problématiques

Bien que l'altimétrie spatiale a considérablement fait progresser notre compréhension de l'océan, nous savons qu'il nous manque encore une part importante de la variabilité océanique associée à la dynamique de sous-mésoéchelle. Comme détaillé précédemment à la section 1.1.3, les structures de sous-mésoéchelle influencent grandement les échanges verticaux de chaleur et de matière, alimentent la circulation de mésoéchelle et participent

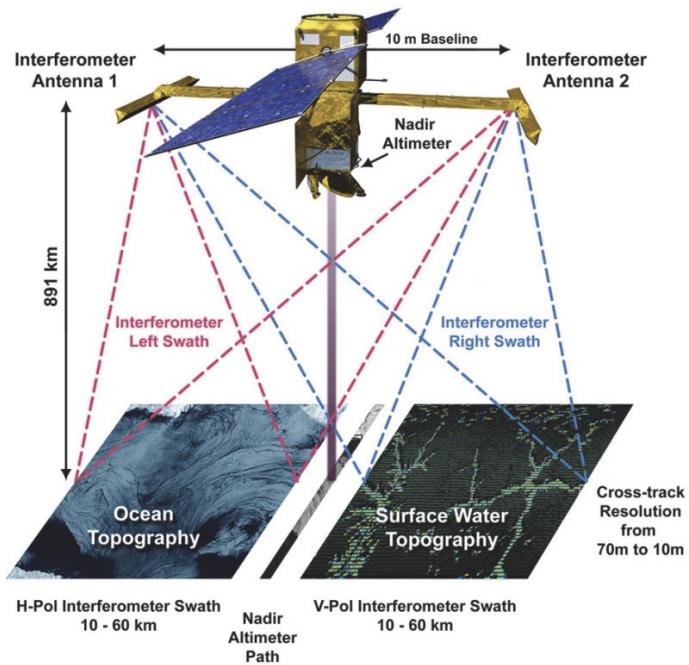


FIGURE 1.12 Principe de mesure du satellite SWOT. Crédits : NASA-JPL

à la dissipation de l'énergie injectée aux grandes échelles. Aujourd'hui, de plus en plus de modèles à haute résolution résolvent les processus de sous-mésoéchelle (Chassignet and Xu, 2017) mais doivent être validés par des observations globales.

La mission SWOT (pour *Surface Water Ocean Topography*; Morrow et al., 2019) développée conjointement par le CNES et la NASA vise à répondre à ce déficit d'observation en fournissant des données 2D de SSH à haute résolution spatiale. Le lancement de la mission est prévu à la fin de l'année 2022. Comme son nom l'indique, la mission regroupe deux communautés : l'océanographie et l'hydrologie. Dans la suite de ce manuscrit, nous nous focaliserons sur les objectifs scientifiques relatifs à l'océan. En particulier, SWOT devra permettre : (i) l'observation du signal de SSH des processus de génération des tourbillons de mésoéchelle (cascade inverse de l'énergie) et des processus de leur dissipation (cascade directe de l'énergie) ; (ii) la compréhension de la dynamique et la variabilité de petite mésoéchelle (voire de sous-mésoéchelle) ; (iii) la mesure des vitesses verticales responsables des flux de chaleur et de matière à travers les couches supérieures de l'océan et (iv) l'observation des ondes de marée internes, notamment les processus de dissipation et d'interaction avec la dynamique équilibrée. Comme tout concept de mesure innovant, la mission s'accompagne de défis techniques qui doivent être traités pour maximiser le retour scientifique de la mission.

1.3.1 Principe de mesure et déroulement de la mission

SWOT embarquera un interféromètre appelé KaRIn (pour Ka-band Radar INterferometer) pour observer des images 2D de SSH sur deux fauchées de 50km de large séparées par un intervalle de 20km de part et d'autre de la trace du satellite (Figure 1.12). Deux antennes SAR, positionnées aux deux extrémités d'un mât de 10m, envoient simultanément des impulsions en bande Ka avec des angles d'incidence proche-nadir entre 0.5° et 4° (Rodriguez et al., 2017). La mesure du déphasage des deux signaux réfléchis par un point cible à la surface de l'océan permet de déterminer sa position en 3D avec une grande précision. Après plusieurs étapes de traitement, deux produits de SSH seront disponibles : (i) produit "HR" à une résolution de 500x500 m et (ii) produit "LR" à une résolution de 2x2 km. L'erreur instrumentale estimée du produit LR est de $2,25 \text{ cm/km}^2$, soit plus d'un ordre de grandeur inférieur aux mesures conventionnelles de type Jason. En plus de l'interféromètre KaRIn, SWOT embarquera un altimètre nadir conventionnel visant à compléter l'intervalle de mesure entre les deux fauchées et contribuer à la constellation d'altimètres de référence pour assurer la cohérence du futur système d'observation altimétrique avec l'actuel (Fu and Ubelmann, 2014).

Ces données 2D de SSH fourniront des observations résolvant des signaux jusqu'à 15-30km de longueur d'onde (correspondant à des tourbillons de taille 7-15km). Cette résolution effective est modulée par le bruit instrumental (majoritairement impacté par les vagues de surface) et l'intensité du signal océanique, qui ont toutes deux une forte variabilité géographique et saisonnière (Wang et al., 2019, figure 1.6). En plus des erreurs typiques de l'altimétrie (voir section 1.2.1), la donnée 2D SWOT est polluée par des erreurs liées à la dimension perpendiculaire à la trace qui sont corrélées spatialement. Ces erreurs sont majoritairement dues au mouvement de roulis du satellite sur son orbite, à l'estimation du déphasage entre les signaux réfléchis deux à deux, et à la dilatation du mât portant les deux antennes SAR. Elles impliquent des biais de grande échelle qui peuvent se superposer aux signaux de mésoéchelle. Dibarboure and Ubelmann (2014) ont proposé plusieurs méthodes empiriques pour estimer l'erreur de roulis (attendue comme étant la composante principale des erreurs spatialement corrélées). Ubelmann et al. (2018) ont développé une approche spectrale permettant d'estimer les distributions d'énergie pour chaque type d'erreur. Ces estimations seront très utiles pour l'implémentation des covariances des erreurs d'observation dans le schéma de cartographie. Une autre technique pour réduire l'impact des erreurs corrélées est de considérer l'information des dérivées d'ordre 1 et 2 de la SSH (Ruggiero et al., 2016). Cependant, le calcul des produits dérivés sur les fauchées SWOT doit s'accompagner d'une méthode de filtrage du bruit instrumental non corrélé spatialement (Gomez-Navarro et al., 2020).

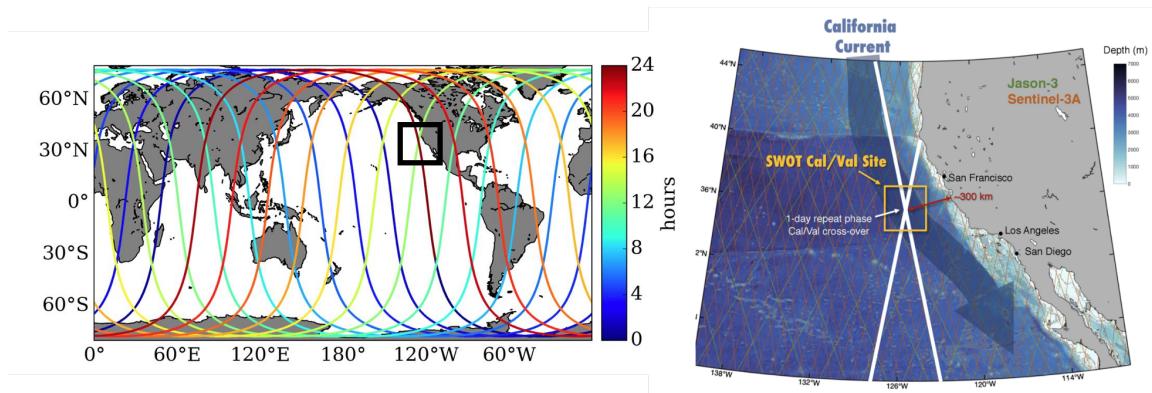


FIGURE 1.13 À gauche : échantillonnage de SWOT lors de la phase Cal/Val (l'échelle de couleur indique le temps de vol du satellite). À droite : zoom sur le crossover au large de la Californie (représenté par le carré noir sur la figure de gauche). Crédits : NASA-JPL

La première phase de la mission sera dédiée à la validation et la calibration des données (phase Cal/Val). Lors de cette phase, d'une durée de 3 mois, le satellite suivra une orbite (dite Fast Sampling Phase) caractérisée par une répétitivité de 24h (Figure 1.13). À certains points d'intersections de deux traces successives (on parle de *crossover*), des campagnes de mesures *in situ* dédiées seront déployées afin de valider et calibrer les nouvelles données SWOT. En particulier, l'orbite a été choisie pour qu'un *crossover* soit localisé simultanément au large de la Californie (Figure 1.13) et dans la mer Méditerranée occidentale pour permettre un déploiement et une maintenance aisées des instruments *in situ*. De plus, cette phase permettra l'étude sans précédent de phénomènes de haute fréquence tels les ondes internes. Cependant, des techniques innovantes doivent être implémentées pour séparer les signaux ondulatoires des signaux équilibrés de meso/submésoscale. Nous reviendrons sur ce point en détail à la section 1.3.3.

La seconde phase de la mission, dite phase nominale ou scientifique, permettra de fournir des observations de SSH sur une large portion du globe entre 78°S et 78°N. Les paramètres de l'orbite (inclinaison de 78° et altitude de 891km) ont été choisis pour minimiser l'aliasing de marée et maximiser la couverture en latitude. Une telle orbite impose un cycle long d'une durée de 21 jours pour une couverture complète à l'équateur. Plus précisément, l'orbite est caractérisée par un sous-cycle de 10 jours permettant une couverture globale mais avec des écarts de l'ordre de la centaine de kilomètres entre deux traces successives. Ces écarts sont comblés pendant les 10 jours suivants. Ainsi, la couverture sera partielle tous les 10 jours, et globale tous les 21 jours (Figure 1.14). Compte tenu du chevauchement des fauchées, l'échantillonnage varie géographiquement, avec deux à quatre passages aux moyennes latitudes, jusqu'à huit passages aux hautes latitudes.

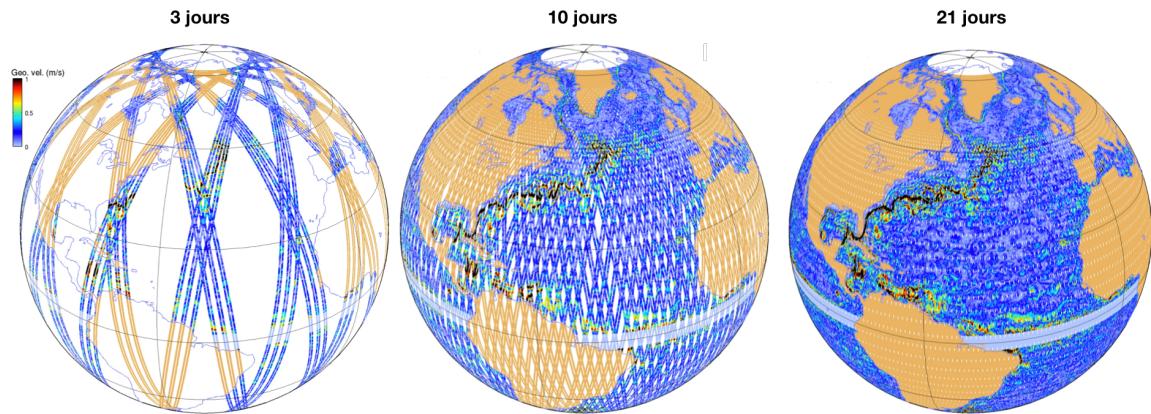


FIGURE 1.14 Courants géostrophiques calculés à partir d’observations synthétiques (extraites à partir d’une simulation à haute résolution) de SWOT pendant sa phase scientifique après 3 jours de vol (à gauche), après un cycle partiel de 10 jour (au milieu) et après un cycle complet de 21 jours (au milieu). Crédits : www.aviso.altimetry.fr

1.3.2 Cartographie haute résolution

SWOT ouvre la voie de la cartographie des structures de petite mésoéchelle. Bien que SWOT fournira des images instantanées de SSH, il sera tout de même nécessaire d’interpoler les données sur une grille régulière en temps et en espace pour suivre l’évolution des structures observées sur les fauchées. En effet, comme le montre la figure 1.15, la superposition des fauchées SWOT produit un champ de SSH discontinu qui scinde les structures observées en plusieurs parties. Une simple comparaison qualitative des champs cartographiés obtenus avec des données SWOT ou avec deux satellites nadir montre un bénéfice évident de la densité de mesure apportée par SWOT pour estimer les structures de mésoéchelle (figure 1.15).

Les outils actuels de cartographie doivent être adaptés pour bénéficier de la haute résolution spatiale apportée par SWOT. En effet, l’océan étant turbulent, les structures de fines échelles spatiales sont régies par des processus rapides, et inversement. Typiquement, un tourbillon de sous-mésoéchelle ($\sim 30\text{km}$) varie sur des échelles temporelles de l’ordre de la journée, alors qu’un tourbillon de mésoéchelle ($\sim 200\text{km}$) varie sur des échelles temporelles de l’ordre de dix jours. Or, pendant sa phase nominale, SWOT repassera au dessus d’un même lieu environ tous les dix jours (figure 1.14). Donc un tourbillon de sous-mésoéchelle observé sur une certaine fauchée ne le sera plus sur la fauchée suivante. L’interpolation actuelle implémentée dans le système DUACS étant linéaire (cf section 1.2.2), ces structures de sous-mésoéchelle, observées une seule fois durant leurs cycles de vie, seront filtrées ou irréalistes. À titre d’exemple, le champ reconstruit avec les données SWOT sur la figure 1.15

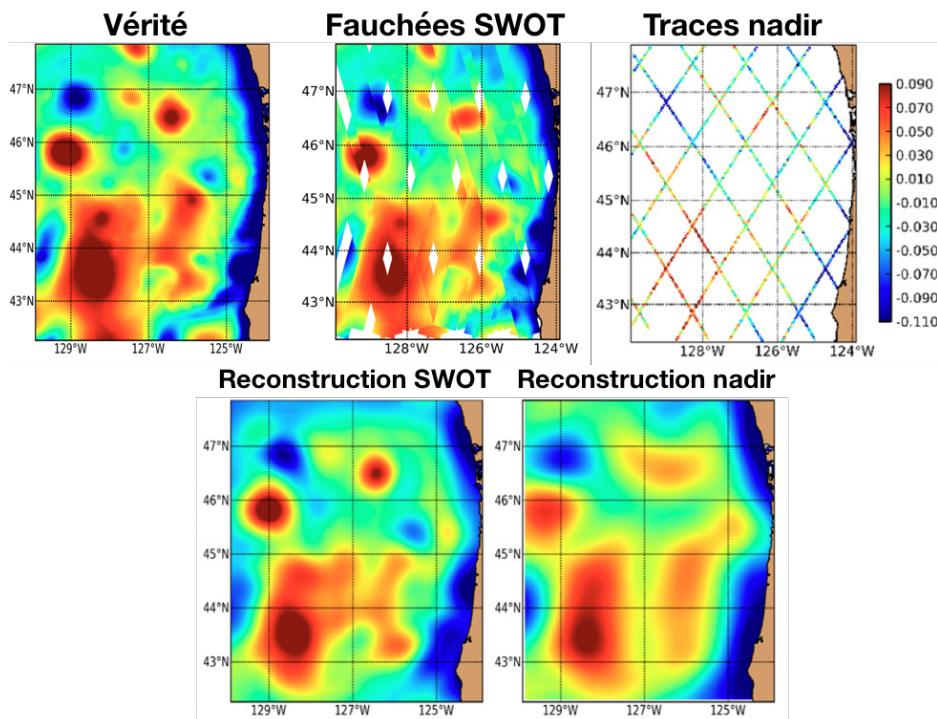


FIGURE 1.15 La vérité du champs de SSH est produite par une simulation haute résolution régionale (ROMS) au large de la côte de l'état de l'Oregon. Les fauchées SWOT sont extraites sur un cycle complet de 21 jours centré sur la date correspondante à la vérité. Les données nadirs sont extraites sur les traces de Jason-1 et Jason-2. Les cartes reconstruites à partir des données SWOT ou nadir sont produites par interpolation optimale (identique à celle implémentée dans le système DUACS). Cette figure est adaptée de Gaultier et al. (2015).

ne contient pas certains tourbillons de sous-mésoéchelle qui sont pourtant bien échantillonnés par le satellite.

Ubelmann et al. (2015) ont proposé d'ajouter une contrainte dynamique dans le schéma d'interpolation pour mieux représenter l'évolution non linéaire des structures de petites échelles. Cette contrainte dynamique est basée sur le formalisme QG en considérant seulement le premier mode barocline, qui représente une large part de la variabilité de SSH (Smith and Vallis, 2001). Cela revient à considérer un océan composé d'une couche et demie (une couche de surface active, une couche en profondeur statique), dont l'évolution est contrainte par la rotation de la Terre et la stratification. Ubelmann et al. (2015) ont alors montré, dans un contexte idéalisé où les données sont complètes en espace, un net bénéfice à utiliser la dynamique QG non linéaire pour interpoler dans le temps deux champs 2D de SSH. Les limites de la technique d'interpolation statistique, et les avantages d'une approche dynamique sont clairs sur la figure 1.16. La partie du haut de la figure montre trois images d'un champs de SSH à trois instants (t_0 , t_5 et t_{10}) séparés de 5 jours deux à deux. Durant ces 10 jours, des tourbillons de sous-mésoéchelle apparaissent et disparaissent. L'interpolation linéaire des images à t_0 et t_{10} filtre entièrement ces tourbillons car elle résulte d'une simple moyenne arithmétique des champs. En revanche, l'interpolation dynamique permet de respecter l'intégrité des tourbillons. Cette preuve de concept a alors mené à l'implémentation d'un algorithme d'interpolation optimale dynamique, similaire à l'interpolation optimale standard implémentée dans DUACS, mais contenant certain termes de correction des vecteurs d'innovation pour tenir compte de la dynamique QG non linéaire. Cette technique expérimentale a été validée récemment avec des données altimétriques nadir simulées (Ubelmann et al., 2016) et réelles (Ballarotta et al., 2020).

1.3.3 Séparation ondes-tourbillons

Aux fines échelles mesurées par SWOT (<100km), les structures équilibrées tourbillonnaires et les ondes (notamment la marée interne) peuvent avoir des niveaux d'énergie semblables. On peut définir une échelle, dite de transition, pour laquelle les énergies cinétiques des deux dynamiques (équilibrée et ondulatoire) sont égales. Au dessus (dessous) de cette échelle, la dynamique équilibrée (ondulatoire) domine. Qiu et al. (2018) ont calculé cette échelle de transition à partir d'un modèle océanique à très haute résolution prenant en compte le forçage des marées. Les auteurs ont montré que cette échelle, moyennée sur une année, a une grande variabilité géographique : elle tombe en dessous de 40 km dans les régions de courant de bord ouest et du courant circumpolaire antarctique, augmente à 40-100 km dans les gyres subtropicaux et subpolaires intérieurs, et dépasse, en général, 200 km dans les océans tropicaux. De plus, plus la couche de mélange est épaisse (fine), plus l'activité

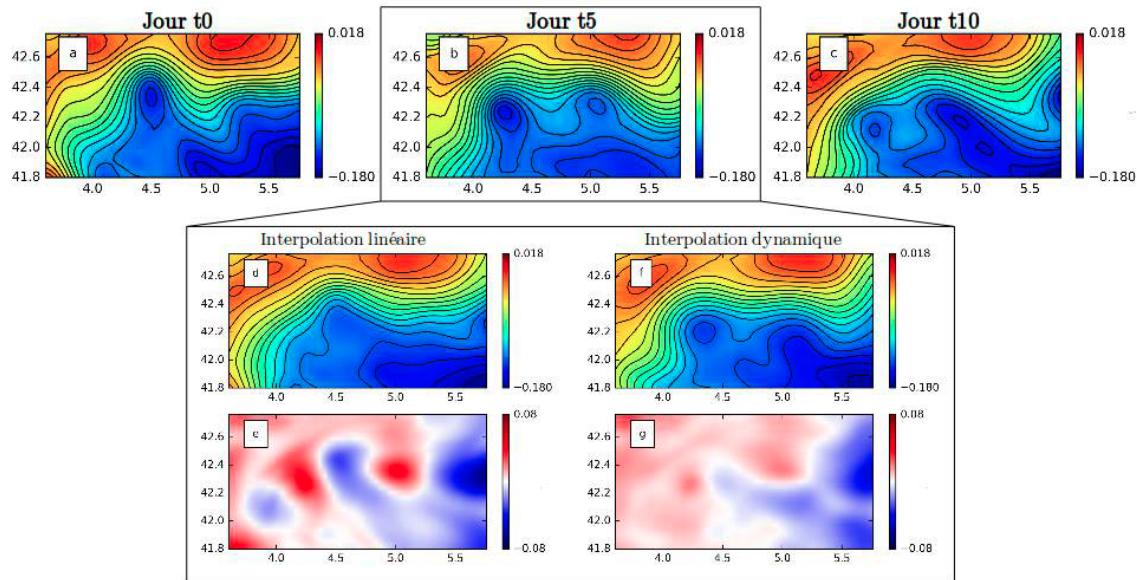


FIGURE 1.16 En haut : champs de SSH de référence issus d'une simulation océanique dans une région du Golfe du Lion séparés de 5 jours deux à deux (t_0, t_5, t_{10}). L'interpolation linéaire des champs à t_0 et t_{10} produit le champ (d), dont l'erreur avec la vérité à t_5 est illustrée par le champ (e). L'interpolation dynamique des champs à t_0 et t_{10} produit le champ (f), dont l'erreur avec la vérité à t_5 est illustrée par le champ (g). Figure tirée de Roge (2018).

turbillonnaire (ondulatoire) est élevée. Ces deux effets combinés impliquent une variabilité saisonnière de l'échelle de transition, avec des valeurs plus élevées l'été que l'hiver. Il est intéressant de comparer l'échelle de transition L_t avec l'échelle spatiale minimale que SWOT pourra résoudre L_s (Wang et al., 2019). La figure 1.17 montre la variation saisonnière et géographique de la quantité $L_t - L_s$. Cette figure révèle que SWOT pourra en théorie observer la transition entre la dynamique équilibrée et ondulatoire quasiment partout et tout le temps, hormis dans une grande partie du courant circumpolaire antarctique, aux hautes latitudes de l'atlantique nord et dans le courant du Kuroshio.

Les dynamiques tourbillonnaire et ondulatoire affectent différemment le budget énergétique de l'océan et devront donc être étudiées séparément pour répondre aux objectifs scientifiques de la mission SWOT. Les structures équilibrées de sous-mésoéchelle véhiculent une grande part des flux verticaux de chaleur et de masse (cf. section 1.1.3), tandis que les ondes internes sont responsables d'une grande part du mélange océanique en dissipant l'énergie des grandes échelles vers les petites échelles (cf. section 1.1.4). De plus, la relation SSH-courants diffère grandement selon la classe de mouvement : la théorie géostrophique ne s'applique absolument pas aux processus ondulatoires. Aussi, la SSH mesurée par SWOT devra être séparée en deux composantes distinctes pour déduire les courants propres à chaque

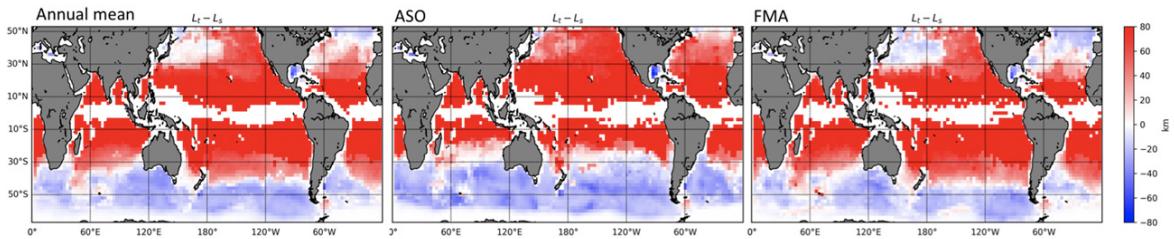


FIGURE 1.17 Variation géographique de la quantité $L_t - L_s$ moyennée sur une année (à gauche), pour les mois d'août-septembre-octobre (au milieu) et pour les mois de février-mars-avril (à droite). Les régions en rouge ($L_t > L_s$) correspondent aux régions où la dynamique ondulatoire domine les fines échelles résolues par SWOT. Cette figure est tirée de Wang et al. (2019).

dynamique, et donc l'énergie cinétique associée (Ponte et al., 2017; Torres et al., 2019). Par ailleurs, les ondes et les tourbillons n'évoluent pas de manière indépendante mais interagissent, modifiant aussi le bilan énergétique de l'océan (Rocha et al., 2018). Cependant ces interactions n'ont jamais été confirmées par des observations *in situ* ou satellites à l'échelle des bassins océaniques ou globale. SWOT, de part sa densité de mesure et sa précision sans précédent, représente une opportunité unique pour caractériser ces interactions (Torres et al., 2019).

La séparation ondes-tourbillons est une problématique complexe qui n'est pas encore résolue aujourd'hui. Ces deux classes de mouvement ont des échelles spatiales qui se chevauchent mais leurs échelles temporelles sont bien distinctes. En particulier, les ondes sont des processus très rapides (évoluant sur des périodes de l'ordre de quelques heures) à l'inverse des mouvements équilibrés, qui par définition, sont régis par des processus sous-inertiels (évoluant sur des périodes de l'ordre de quelques jours). Les données SWOT, dont la résolution temporelle est de l'ordre de dix jours, ne pourront être exploitées seules pour résoudre la dynamique ondulatoire. Pour s'extraire de ce sous-échantillonnage temporel, Torres et al. (2019) ont mis au point une méthode spectrale permettant d'extraire les signatures des deux dynamiques, et d'évaluer leurs interactions, à partir d'une simple image de SSH (équivalente à une fauchée SWOT). Cependant, cette méthode est surtout pertinente en période estivale lors de laquelle le chevauchement des échelles spatiales des deux dynamiques est minimal. Une autre stratégie est de combiner d'autres données spatiales (SST, SSS) avec la SSH sur lesquelles les dynamiques ont des signatures différentes (Ponte et al., 2017; Torres et al., 2018).

Parmi l'ensemble des dynamiques ondulatoires intervenant aux petites échelles (<100km), la marée interne est celle qui est le plus envisageable à être séparée de la dynamique équilibrée à partir des données SWOT. En effet, comme expliqué à la section 1.2.3, la marée interne

stationnaire oscille aux fréquence de marée, fixe, par définition. Une analyse harmonique sur une séquence suffisamment longue de donnée altimétrique permet alors d'estimer la signature en terme de SSH de la marée interne stationnaire. SWOT, de part sa densité de mesure, permettra d'estimer une plus grande variabilité des modes supérieurs (d'échelles spatiales plus fines) de la marée interne stationnaire que le peut l'altimétrie d'aujourd'hui. Cependant, une part importante de la marée interne est non stationnaire, et cette part est d'autant plus importante que les modes sont élevés. Cette non-stationnarité est générée par interactions avec la dynamique équilibrée (Dunphy et al., 2017) et modulée par la stratification (Barbot et al., 2021). L'échelle temporelle de variation de la non-stationnarité varie de l'ordre de quelques jours à quelques dizaines de jours (Nash et al., 2012). Bien qu'une analyse harmonique serait inefficace pour extraire cette variabilité, des méthodes invoquant des contraintes dynamiques simulant les processus de génération de la non-stationnarité devraient tirer parti de la densité des données SWOT pour estimer une partie de cette marée non stationnaire.

1.3.4 Reconstruction de la circulation en profondeur

La mission SWOT représente une opportunité exceptionnelle pour l'estimation de la circulation océanique en profondeur. En effet, comme mentionné dans le section 1.2.3, les cartes de SSH peuvent être fusionnées avec des mesures ponctuelles *in situ* en profondeur pour déduire la dynamique 3D dans l'océan. Or, la résolution des cartes de SSH est le principal facteur limitant cette reconstruction. Dans ce contexte, les données à haute résolution spatiale de SWOT devraient apporter une contribution sans précédent à l'étude de la dynamique 3D.

Récemment, plusieurs études ont exploré des méthodes dynamiques pour estimer la structure 3D de la circulation océanique à partir de données SSH et/ou SST à haute résolution. Ces études se basent sur le principe que les corrélations entre les dynamiques de surface et en profondeur sont les mêmes à petite et grande échelles. Par conséquent, les corrélations peuvent être estimées avec des observations climatologiques (de grande échelle) pour déduire la dynamique en profondeur grâce aux observations de surface (de petite échelle). L'approche la plus simple utilise le formalisme eSQG (pour *effective* SQG) dans lequel la dynamique en profondeur est implicitement prise en compte par une flottabilité (ou *buoyancy* en anglais) effective. Cette approche a été testée en utilisant la SSH seule dans des contexte idéalisés (Klein et al., 2009; Ponte and Klein, 2013) et réalistes en prenant en compte l'échantillonnage et les erreurs de mesure (Qiu et al., 2016) et les processus ondulatoires (Qiu et al., 2020). Dans le cas où la dynamique de surface est peu corrélée à la dynamique en profondeur, Wang et al. (2013) ont proposé d'ajouter la SST (considéré comme un proxy de la densité de surface) dans le processus de reconstruction.

La problématique de reconstruction 3D à partir des données SWOT est intimement liée aux problématiques de cartographie (voir section 1.3.2) et de séparation ondes/tourbillons (voir section 1.3.3). En effet, les méthodes dynamiques mentionnées plus haut sont dégradées lorsque l'échantillonnage, les erreurs de mesure et la signature ondulatoire sur la SSH sont prises en compte. Dans cette thèse, nous avons choisi d'écartier cette problématique de reconstruction 3D et se concentrer sur les deux problématiques précédentes.

1.4 Motivations et stratégie du travail de thèse

1.4.1 Résumé de l'introduction

L'océan régule notre climat à travers une multitude de processus à différentes échelles spatio-temporelles qui interagissent entre eux de manière complexe en s'échangeant de l'énergie. La circulation générale, à l'échelle globale, forcée par les vents à la surface et par les gradients de densité en profondeur, forme la circulation méridienne de retournement (cf. section 1.1.1). Cette circulation de grande échelle donne naissance à des structures de mésoéchelle (100–1000km, de l'ordre de la dizaine de jours), sous forme de tourbillons et de méandres, qui sont responsables d'une grande partie du transport latéral de chaleur et de matière (sel, carbone etc...) et qui peuvent influencer en retour la circulation à grande échelle (cf. section 1.1.2). Récemment, des études numériques ont mis en évidence l'omniprésence de structures de sous-mésoéchelle (1–100km, de l'ordre de la journée) qui induisent une grande partie des flux verticaux de chaleur et de masse et qui interagissent avec les structures de mésoéchelle et la circulation générale (cf. section 1.1.3). Enfin, les processus de mésoéchelle et sous-mésoéchelle interagissent avec des processus ondulatoires régis par des dynamiques bien plus rapides (de l'ordre de l'heure), qui jouent un rôle fondamental dans la dynamique océanique en dissipant l'énergie aux plus petites échelles spatiales (cf. section 1.1.4).

L'avènement de l'altimétrie spatiale dans les années 1990s a révolutionné notre compréhension de la dynamique de mésoéchelle en fournissant des mesures de SSH sur une grande partie du globe, permettant de déduire une variété de propriétés de la dynamique océanique. Un altimètre, dit "nadir", mesure des profils 1D de SSH avec une précision centimétrique et une répétitivité de l'ordre de la dizaine de jours (cf. section 1.2.1). La chaîne DUACS permet d'améliorer l'échantillonnage spatio-temporel des données altimétriques en interpolant optimalement les données 1D fournies par différentes missions altimétriques sur une grille régulière en temps et en espace (cf. section 1.2.2). Ces cartes 2D de SSH ont permis de caractériser la dynamique tourbillonnaire, de calculer les courants de surface et de déduire des propriétés de l'écoulement de profondeur (cf. section 1.2.3). Cependant, la résolution spatiale

de ces cartes, intrinsèquement limitées par l'échantillonnage et la précision de l'altimétrie nadir, ne permet pas d'observer convenablement les structures de sous-mésoéchelle, que l'ont sait essentielles pour la compréhension, la modélisation et la prévision du système climatique (cf. section 1.2.4).

La future mission altimétrique SWOT devrait aussi apporter une révolution dans le domaine de l'océanographie en aidant à caractériser les processus de sous-mésoéchelle et les mécanismes de dissipation de l'énergie. SWOT fournira des données 2D de SSH sur une fauchée de 120km de large avec une résolution et une précision dix fois supérieures à l'altimétrie nadir, permettant ainsi l'observation des structures jusqu'à 15-30 km de longueurs d'onde (cf. section 1.3.1). Pour bénéficier au maximum de la haute résolution spatiale apportée par SWOT tout en compensant sa faible résolution temporelle, l'algorithme d'interpolation linéaire actuellement implémenté dans la chaîne DUACS doit être amélioré pour tenir compte de la dynamique non-linéaire des structures rapides de sous-mésoéchelle (cf. section 1.3.2). La donnée SWOT sera constituée de la superposition du signal de sous-mésoéchelle et du signal ondulatoire (notamment dû à la marée interne) qui devront être séparés pour étudier les propriétés dynamiques de chaque classe de mouvement (cf. section 1.3.3) et ainsi atteindre les objectifs scientifiques de la mission, notamment la reconstruction de la circulation en profondeur (cf. section 1.3.4).

1.4.2 Approche et objectifs de la thèse

Dans cette thèse, nous proposons d'explorer la capacité de la mission SWOT à répondre à ses objectifs scientifiques en développant des outils innovants pour maximiser le contenu scientifique des futures données. Pour cela, nous traitons à la fois la problématique de la cartographie de SSH à haute résolution et la séparation des dynamiques équilibrée et ondulatoire. Que ce soit pour l'une ou l'autre des problématiques, le défi est de compenser la faible résolution temporelle de SWOT tout en bénéficiant de sa haute résolution spatiale.

Notre stratégie est d'inclure la dynamique de l'océan dans les outils de cartographie de SSH sous forme d'assimilation de données avec des modèles physiques. Un modèle fournit une représentation complète 3D (temps + espace) de la SSH, même si elle ne correspond pas toujours aux observations. Dans un processus d'assimilation de données, il agit comme un interpolateur physique des observations dans l'espace et le temps. L'assimilation de données vise à fusionner les données du modèle et les observations pour produire des cartes de SSH cohérentes à la fois avec les observations et la dynamique du modèle.

Nous utiliserons des modèles physiques spécifiques à chaque dynamique (équilibrée ou ondulatoire). Le choix s'est porté sur des modèles réduits, simulant une vue "grossière" de la réalité. Ce choix est motivé par trois raisons. Premièrement, nous voulons éviter que

le modèle simule des processus que les données ne peuvent ni observer ni contraindre. Deuxièmement, nous souhaitons limiter le coût de calcul et maximiser la portabilité des outils développés. Troisièmement, s'extraire de la complexité d'un modèle permet de choisir des techniques d'assimilation de données adaptées aux problèmes d'inversion considérés.

Une dimension importante de ce travail de thèse est l'évaluation des performances des outils développés, selon des métriques adaptées, et leur comparaison éventuelle au système DUACS. Pour cela, nous nous placerons dans des contextes expérimentaux faisant appel à des données simulées ou réelles. Les données simulées seront extraites à partir de simulations numériques à haute résolution, fournissant une évolution réaliste de l'état de l'océan. Bien évidemment, la mission SWOT n'étant pas encore lancée, l'utilisation de données réelles se limitera à l'altimétrie nadir.

1.4.3 Plan du manuscrit

Dans le chapitre 2, nous introduisons de façon cohérente sur le plan théorique les principales méthodes utilisées au cours de cette thèse. En particulier, nous présentons les modèles dynamiques, les différents algorithmes d'assimilation de données, et les stratégies de validation des performances des outils de cartographie. Ce chapitre a pour vocation principale d'aider la lecture des chapitres suivants.

Dans le chapitre 3, nous présentons un algorithme d'assimilation de donnée, le *Back and Forth Nudging* (BFN), accompagné d'un modèle QG à une couche et demie, pour cartographier la dynamique équilibrée à partir de données simulées SWOT et nadirs. Cette méthode, appelée BFN-QG dans la suite, est testée avec des données SWOT et nadirs simulées dans une région du courant du Gulfstream. Les performances de cartographie sont comparées à celles des produits opérationnels DUACS grâce à une série de diagnostiques statistiques et spectraux.

Dans le chapitre 4, nous proposons d'appliquer la méthode du BFN-QG à des données altimétriques réelles dans la région du courant des aiguilles. Une nouvelle série de diagnostiques se focalisant sur la reconstruction des courants géostrophiques est présentée.

Dans le chapitre 5, nous nous focalisons sur la problématique de la séparation ondes-tourbillons. Une méthode de minimisation alternée permettant de cartographier conjointement les dynamiques équilibrée et de marée interne est présentée. Cette méthode articule itérativement deux méthodes d'assimilation de donnée, chacune propre à la cartographie d'une dynamique. Les performances de séparation sont validées dans un contexte idéalisé, avec des données simulées complètes en espace, et une physique ondulatoire simplifiée.

Dans le chapitre 6, nous continuons à traiter la problématique de séparation ondes-tourbillons, cette fois-ci dans le contexte de la phase Cal/Val de SWOT autour du crossover

situé au large de la Californie. Les premiers essais d'une nouvelle méthode d'assimilation de données, héritant en grande partie des outils développés dans les chapitres précédents, sont présentés.

Le chapitre 7 dresse un bilan de la recherche menée au cours de cette thèse et des enjeux futurs pour les applications aux futures données réelles SWOT.

Chapitre 2

Approche méthodologique et outils numériques

Ce chapitre permet de présenter les différents éléments méthodologiques et numériques utilisés tout au long de cette thèse. Dans un premier temps, nous développons les équations physiques simplifiées de la dynamique de l'océan de surface, ainsi que les hypothèses adaptées à chaque type de dynamique (équilibrée ou ondulatoire). Dans un second temps, nous introduisons quelques concepts clés de l'assimilation de données, en insistant sur les méthodes pertinentes pour la problématique de cartographie. Enfin, nous décrivons succinctement les stratégies expérimentales mises en place dans cette thèse pour évaluer les performances des outils de cartographie ainsi que les métriques qui permettent de les inter-comparer.

Ce chapitre n'a pas vocation à fournir une vue complète et détaillée de l'ensemble des méthodes développées dans cette thèse, mais plutôt d'articuler l'ensemble des concepts dans un format synthétique et cohérent. Le lecteur trouvera les détails méthodologiques et techniques des outils développés dans les chapitres suivants.

2.1 Modèles dynamiques réduits

2.1.1 Équations simplifiées pour un océan peu profond

La dynamique et la physique de l'océan est communément représentée avec les équations primitives océaniques, c'est à dire les équations de Navier-Stokes adaptées et simplifiées pour les spécificités de l'océan. Ces équations connectent les vitesses 3D du fluide \mathbf{u} , sa densité ρ et sa pression P . La modélisation de ces équations pour simuler la dynamique de l'océan s'opère en discrétilisant l'espace et le temps en un certain nombre de pas. La longueur

de ces pas définit la résolution du modèle. La simulation de la dynamique complète nécessite de très hautes résolutions spatiale et temporelle. Même les modèles numériques les plus performants d'aujourd'hui utilisent des équations simplifiées après hypothèses.

Il est très courant d'utiliser les approximations hydrostatique, d'incompressibilité et de Boussinesq pour décrire la dynamique de l'océan. Ces approximations mènent au système d'équations suivant :

$$\frac{D\mathbf{u}_H}{Dt} + f\mathbf{k} \times \mathbf{u}_H = -\frac{1}{\rho_0} \nabla_H P \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (2.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.1c)$$

où $\frac{D\cdot}{Dt} = (\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla)(\dots)$ est la dérivée particulaire, ∇_H est la composante horizontale de $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$. \mathbf{u}_H est le vecteur vitesse horizontal, f est la fréquence de Coriolis, \mathbf{k} est le vecteur unitaire vertical, ρ_0 est la densité moyenne et g l'accélération de la pesanteur. L'équation 2.1a décrit l'équilibre entre les termes d'accélération horizontale et les gradients horizontaux de pression. L'approximation d'hydrostatique impose l'équilibre entre le gradient vertical de pression et la pesanteur (équation 2.1b). L'approximation d'incompressibilité considère que le volume d'une particule de fluide se conserve (équation 2.1c). L'approximation de Boussinesq néglige les forces de compression excepté pour calculer les forces de flottabilité hydrostatique (qui se traduit par la densité constante ρ_0 dans l'équation 2.1a).

Comme dans cette thèse on s'intéresse à la dynamique de surface et à des échelles régionales, on peut, de manière très approximative, considérer l'océan comme étant constitué d'une seule couche homogène, $\rho = \rho_0$ en tout point de l'espace. Dans cette configuration, seul le mode barotrope de l'écoulement est simulé. La densité ρ étant constante, l'intégration de l'équation 2.1b sur la verticale implique la proportionnalité entre la hauteur de la surface de l'océan h et P : $P = \rho_0 gh$ (en supposant la constante d'intégration nulle, sans perte de généralité). On écrit $h = H + \eta$ où H est la hauteur moyenne de la surface et η l'anomalie par rapport à H . Dans la suite, nous ignorons la topographie : le fond de l'océan est considéré plat. Notons que dans ce contexte, la variable η est équivalente à la SSH. Les équations 2.1 peuvent alors être combinées pour se réduire à un système de deux équations qui décrit entièrement la dynamique horizontale du système :

$$\frac{D_H \mathbf{u}_H}{Dt} + f\mathbf{k} \times \mathbf{u}_H = -g \nabla_H \eta \quad (2.2a)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla_H \cdot (h\mathbf{u}_H) = 0 \quad (2.2b)$$

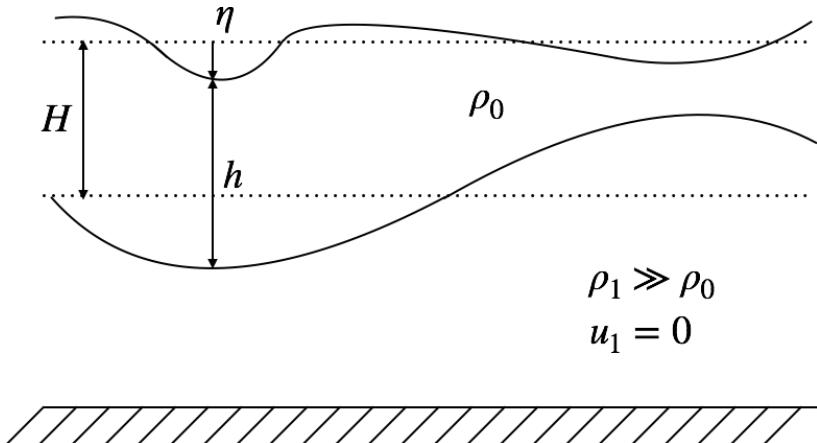


FIGURE 2.1 Schéma d'un modèle réduit à une couche et demie simulant la dynamique du premier mode barocline avec une bathymétrie constante.

Toutes les variables apparaissant dans les équations 2.2 ne dépendent que des coordonnées horizontales. Dans la suite, nous utiliserons exclusivement les équations 2.2 et nous omettrons les indices $(.)_H$ par souci de clarté. Notons toutefois que ce système autorise des vitesses verticales grâce à l'équation 2.1c mais elles n'apparaissent plus dans le système d'équations.

L'effet de la stratification sur la dynamique de surface peut être pris en compte en considérant une couche légère et dynamique en surface au dessus d'une couche plus dense et statique (Figure 2.1). Ce modèle, appelé modèle à gravité réduite à une couche et demie, simule la dynamique du premier mode barocline qui explique l'essentiel de la variabilité de la SSH (Wunsch, 1997). La dynamique de la couche supérieure satisfait les équations 2.2, excepté que la variable h correspond désormais à l'épaisseur de la couche, et non plus à la profondeur totale de l'océan. Toutefois, on peut relier h à la SSH η via : $h = \frac{\rho_0}{\Delta\rho} \eta$ avec $\Delta\rho = |\rho_1 - \rho_0| \ll \rho_0$. L'équation 2.2b s'écrit alors :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\Delta\rho}{\rho_0} \nabla \cdot (h \mathbf{u}) = 0 \quad (2.3)$$

Tout se passe comme si la couche supérieure avait une épaisseur moyenne H_e telle que :

$$H_e = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} H \quad (2.4)$$

2.1.2 Approximations et équations pour la dynamique quasi-géostrophique

L'hypothèse fondamentale permettant de formuler l'approximation QG est de considérer les forces d'inertie faibles devant l'effet de la rotation de la Terre, matérialisé par la force de Coriolis. En notant U l'échelle caractéristique des vitesses et L l'échelle horizontale de

l'écoulement, cette hypothèse se traduit par :

$$Ro = \frac{U}{fL} \ll 1 \quad (2.5)$$

Ro est appelé le nombre de Rossby.

Une autre hypothèse est de considérer de faibles variations de la fréquence de Coriolis avec la latitude. En pratique, nous notons $f = f_0 + \beta y$ où y est la coordonnée méridienne. Nous avons $\beta L / f_0 \ll Ro$. Notons toutefois que cette hypothèse n'est pas valide dans les tropiques.

On décompose le champ de vitesse \mathbf{u} en deux composantes : une composante géostrophique \mathbf{u}_g (connue) et une composante agéostrophique \mathbf{u}_a (inconnue) :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_g + \mathbf{u}_a \quad (2.6)$$

avec :

$$\mathbf{u}_g = -\frac{g}{f_0} \mathbf{k} \times \nabla \eta \quad (2.7)$$

On cherche un état très proche de la géostrophie, donc on considère une composante agéostrophique faible devant la composante géostrophique : $\frac{\mathbf{u}_a}{\mathbf{u}_g} \sim Ro \ll 1$.

En injectant cette décomposition dans les équations 2.2 et en ne gardant que les termes d'ordre de grandeur du nombre de Rossby (on néglige les termes d'ordres supérieurs), on obtient le système d'équation suivant :

$$\frac{D_g \mathbf{u}_g}{Dt} + f_0 \mathbf{k} \times \mathbf{u}_a + \beta y \mathbf{u}_g = 0 \quad (2.8a)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla \eta + H(\nabla \cdot \mathbf{u}_a) = 0 \quad (2.8b)$$

où $\frac{D_g \dots}{Dt} = (\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla)(\dots)$ est la dérivée temporelle lagrangienne le long des trajectoires de l'écoulement géostrophique. H est l'épaisseur moyenne de la couche océanique (profondeur totale pour le mode barotrope). Pour le premier mode barocline, nous rappelons qu'il faut remplacer H par H_e pour tenir compte de l'effet de la stratification (équation 2.4).

Après quelques manipulations de ces équations pour faire disparaître la composante \mathbf{u}_a inconnue, on obtient une seule et unique équation faisant intervenir une quantité conservatrice essentielle en océanographie physique, la vorticité potentielle QG :

$$\frac{D_g q}{Dt} = 0 \quad (2.9)$$

avec :

$$q = \nabla^2 \psi_g + \beta y - \frac{1}{L_D^2} \psi_g \quad (2.10)$$

entièrement déterminée par la fonction de courant ψ_g , proportionnelle à la SSH :

$$\psi_g = \frac{g}{f_0} \eta \quad (2.11)$$

et $L_D = \sqrt{gH}/f_0$ est le rayon de déformation de Rossby qui représente l'échelle spatiale caractéristique des processus respectant la dynamique QG. Numériquement, on a $L_D \sim 1000\text{km}$ (50km) pour le mode barotrope (premier mode barocline) aux moyennes latitudes.

L'expression de q est donc la somme de trois termes : (i) la vorticité relative $\nabla^2 \psi_g$ représente l'amplitude du taux de rotation de l'écoulement (variable pertinente pour étudier les tourbillons) ; (ii) la vorticité planétaire βy représente le taux de rotation du repère inertiel ; et (iii) le terme d'étirement $-\frac{1}{L_D^2} \psi_g$ représente l'effet de la stratification sur la dynamique de surface.

L'équation 2.9 traduit la conservation de la vorticité potentielle q le long de l'écoulement géostrophique. Numériquement, la propagation d'un champ de SSH à un instant donné se résume à une succession d'étapes : (i) les courants géostrophiques sont calculés à partir de la SSH via l'équilibre géostrophique, (ii) le champ de vorticité potentielle est propagé grâce à l'équation 2.9 ; (iii) la SSH propagée est ensuite estimée en inversant l'équation 2.10 (par une méthode spectrale ou de descente de gradient).

Dans la suite du manuscrit, on simulera la dynamique équilibrée avec l'équation 2.9 en se concentrant sur le premier mode barocline dont la structure spatiale est caractérisée par H_e .

2.1.3 Approximations et équations pour la dynamique d'ondes internes

La dynamique ondulatoire s'obtient en linéarisant les équations 2.2 autour d'un état au repos $\mathbf{u} = (0, 0)$ et $h = H$ et en considérant le paramètre de Coriolis constant $f = f_0$. Ici encore, H est remplacé par H_e pour le premier mode barocline. Les équations deviennent alors :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + f_0 \mathbf{k} \times \mathbf{u} = -g \nabla \eta \quad (2.12a)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.12b)$$

Ces équations peuvent être combinées pour donner l'équation d'onde suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + f_0^2 - c^2 \nabla^2 \right) \eta = 0 \quad (2.13)$$

où $c = \sqrt{gH}$ est la vitesse des ondes de gravité. Pour le mode barotrope, on a $c \sim 200\text{m/s}$ et pour le premier mode barocline on a $c \sim 3\text{m/s}$.

Tout champ d'onde peut être décomposé en une combinaison linéaire d'ondes planes. On cherche donc des solutions de la forme $\eta(t, \mathbf{x}) = \eta_0 e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}$ où \mathbf{K} est le vecteur d'onde, ω la pulsation et i le nombre imaginaire pur. En substituant cette expression de η dans l'équation d'onde, on obtient l'équation de dispersion suivante :

$$\omega(f_0^2 + c^2 |\mathbf{K}|^2 - \omega^2) = 0 \quad (2.14)$$

qui a deux solutions :

- $\omega = 0$: solution stationnaire correspondant à l'équilibre géostrophique ;
- $\omega^2 = f_0^2 + c^2 |\mathbf{K}|^2$: solution correspondant aux ondes internes de gravité. D'après la forme de cette solution, les ondes sont super-inertielles, i.e elles ont des fréquences nécessairement supérieures à la fréquence de Coriolis f_0 . De plus, ces ondes sont dispersives : plus leur longueur d'onde est faible et plus elles sont rapides. Dans le cas de la marée interne, la fréquence ω étant fixée par la marée (par exemple, la composante M2 a une période de 12.4 heures), la longueur d'onde est entièrement modulée par c .

Dans la suite du manuscrit, on simulera la dynamique de la marée interne avec le système d'équation 2.12 et $H = H_e$. Ces équations sont propres à un mode barocline, dont la structure spatiale est modulée par H_e .

2.2 Éléments d'assimilation de données

L'assimilation de données permet de combiner différentes sources d'information pour estimer l'état d'un système. Dans les sciences de l'océan ou de l'atmosphère, ces sources sont généralement de deux sortes : (i) des observations partielles inégalement réparties dans le temps et dans l'espace entachées d'erreur de mesure et (ii) des modèles dynamiques fournissant des trajectoires plus ou moins réalistes de l'évolution spatio-temporelle des variables décrivant le système d'étude. Cette combinaison des observations et d'un modèle permet d'estimer des variables non observées d'une part et d'extrapoler les observations en temps et en espace d'autre part. Le résultat de l'assimilation de données est alors plus réaliste que si les observations, ou le modèle, avaient été considérés seuls.

La problématique de la reconstruction spatio-temporelle de la topographie de l'océan de surface à partir de données altimétriques est traitée, dans cette thèse, avec des méthodes d'assimilation de données dites de *lissage*. Tandis que les méthodes de *filtrage* utilisent l'information des observations des temps passés (via les statistiques d'ébauche) et présent (via l'analyse), les méthodes de *lissage* considèrent en plus l'information des observations des temps futurs. Les méthodes de lissage sont alors particulièrement adaptées pour reproduire des évolutions dynamiques passées, lorsque l'historique des données est disponible : on parle de réanalyse. Dans un contexte de réanalyse de la dynamique de SSH, il nous semble alors judicieux d'employer de telles méthodes pour cartographier les données altimétriques, car les observations futures renseignent sur la dynamique passée. Comme pour les modèles dynamiques introduits à la section précédentes, nous utiliserons/développerons des méthodes spécifiques à une classe de dynamique (équilibrée et/ou ondulatoire).

Cette section est divisée en trois parties. Dans la première partie, nous définissons les concepts clés de l'assimilation de données et introduisons une première méthode : la méthode dite de *nudging*. Dans la seconde partie, nous traitons spécifiquement le cas des méthodes de *lissage* qui nous semblent pertinentes pour la reconstruction spatio-temporelle de la topographie de l'océan de surface. Enfin, nous introduisons la notion de réduction d'ordre qui permet de réduire le coût numérique des méthodes d'assimilation de données.

2.2.1 Vocabulaire et méthode de Nudging

On cherche à estimer l'état \mathbf{x} d'un système, qui varie généralement de manière continue dans le temps et l'espace (par exemple la valeur de la température en tout point dans l'océan Atlantique et à tout instant). On pose \mathcal{M} l'opérateur dynamique qui régit l'évolution spatio-temporelle de \mathbf{x} tel que :

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\mathbf{x}) \quad (2.15)$$

En pratique, l'état \mathbf{x} est discréteisé sur une grille spatio-temporelle (ensemble de pixels à des intervalles de temps réguliers) du modèle numérique choisi. En notant \mathbf{x}_i l'état du système au temps t_i et N le nombre de pas de temps, on écrit l'intégration directe du modèle comme suit :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_0 &= \mathbf{x}(t_0) \\ \mathbf{x}_{i+1} &= \mathcal{M}_{i,i+1}(\mathbf{x}_i) , \quad i = 0, N-1 \end{cases} \quad (2.16)$$

où $\mathcal{M}_{i,i+1}$ représente l'opérateur dynamique qui propage l'état du système du temps t_i au temps t_{i+1} . Lorsque la dynamique du modèle est linéaire, l'opérateur \mathcal{M} peut s'exprimer

sous la forme d'une matrice M . C'est le cas notamment du modèle présenté à la section 2.1.3. En revanche, la dynamique QG présentée à la section 2.1.2 est non linéaire.

On suppose que l'on dispose d'un ensemble d'observations du système, rassemblées dans le vecteur \mathbf{y}^o . Les observations ne sont pas forcément co-localisées avec les points de grille du modèle et leur nature peut être différente des variables du modèles. Pour ces deux raisons, il est nécessaire d'introduire un opérateur d'observation \mathcal{H} permettant de passer de l'espace d'état du système à l'espace des observations :

$$\mathbf{y}^o = \mathcal{H}(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

Tout comme l'opérateur dynamique, l'opérateur d'observation peut être linéaire et donc exprimé à l'aide d'une matrice, notée H . Cette propriété sera toujours vérifiée dans cette thèse car la SSH (quantité observée) sera toujours une variable d'état des modèles utilisés. Les matrices H réaliseront alors simplement l'interpolation de la SSH du modèle sur les points de mesure. Cependant, pour certaines applications, \mathcal{H} peut représenter un modèle physique, possiblement non linéaire. Les erreurs d'observations sont alors la somme des erreurs de mesures (par exemple dues à l'instrument) et les erreurs propres à l'opérateur d'observation \mathcal{H} (d'interpolation ou de modélisation, par exemple).

La méthode de "nudging" est une technique d'assimilation de donnée très simple qui consiste à modifier l'équation de propagation 2.15 pour tenir compte des observations dans la dynamique du modèle. En pratique, on ajoute un terme de rappel proportionnel à la différence entre l'état du modèle et les observations. La nouvelle équation de propagation s'écrit alors :

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\mathbf{x}) - K(\mathcal{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^o) \quad (2.18)$$

K est la matrice de gain de nudging qui module le poids des observations sur la dynamique du modèle, dont le choix demande un peu d'attention pour assurer de bonnes performances de cette technique d'assimilation. En effet, il doit permettre de donner une structure spatio-temporelle à des observations ponctuelles afin notamment d'éviter des instabilités numériques dans le modèle.

2.2.2 Méthodes de lissage

Comme défini au début de cette section, les méthodes de lissage permettent d'estimer la trajectoire d'un modèle au sein d'un intervalle de temps $[t_0, t_1]$ en tenant compte des observations contenues dans cet intervalle. Ainsi, l'état du modèle x_i à un temps $t_i \in [t_0, t_1]$ est contraint par des observations passées, présentes et futures. Cet aspect est attrayant pour

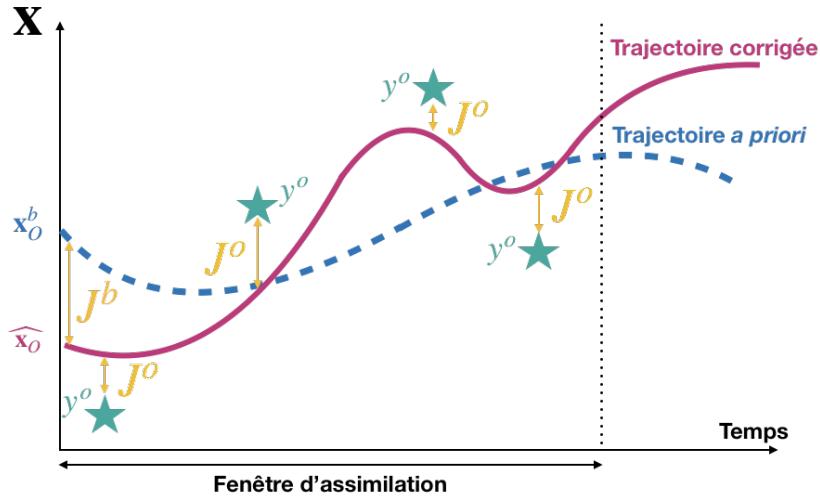


FIGURE 2.2 Schéma de la trajectoire temporelle du système avant (courbe bleue) et après (courbe mauve) assimilation des observations (représentées par les étoiles) par la méthode du 4Dvar.

la problématique de cartographie de SSH dans le contexte de la mission SWOT pour pallier au déficit de résolution temporelle du satellite.

La méthode du *Back and Forth Nudging*

Une méthode originale, que l'on peut considérer comme une méthode de lissage, est le *Back and Forth Nudging* (BFN), introduit par Auroux and Blum (2008). Cette méthode se base sur l'opération de nudging introduit dans la partie précédente (équation 2.18). La méthode combine une intégration directe et une intégration rétrograde du modèle au sein de l'intervalle $[t_0, t_1]$, toutes deux forcées par deux termes de nudging $K(\mathcal{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^o)$ de signes opposés, dans un processus itératif. L'algorithme 1 fournit, après convergence, une trajectoire du système qui est un compromis entre les observations et la dynamique du modèle considéré.

Nous avons implémenté le BFN pour assimiler les observations altimétriques dans le modèle (non linéaire) QG (voir section 2.1.2) pour cartographier la composante équilibrée de la SSH (c.f. chapitres 3 et 4). Ce choix a été motivé par plusieurs aspects. Premièrement, le terme de nudging se calcule aisément car la variable prognostique du modèle QG (la vorticité potentielle) est directement liée à la SSH (équation 2.10). Deuxièmement, le BFN est un lisseur, donc il permet d'exploiter des observations futures pour contraindre l'état présent du modèle. Troisièmement, le BFN permet de respecter les non linéarités du modèle. Enfin, il ne demande aucun stockage de variables intermédiaires qui le rend moins coûteux que d'autres méthodes plus classiques (comme le 4Dvar par exemple, voir paragraphe suivant).

Algorithme 1 : Itérations du BFN. $\mathbf{x}^{f,n}$ (resp. $\mathbf{x}^{b,n}$) est la trajectoire du modèle direct \mathcal{M}^f (resp. rétrograde \mathcal{M}^b) à l’itération n . Notons que généralement, on choisit d’employer le BFN lorsque le modèle est réversible ; dans ce cas, on a $\mathcal{M}^f = \mathcal{M}^b$. Les paramètres de l’algorithme sont : le nombre d’itération maximal n_{max} , la période d’assimilation $t_1 - t_0$, une condition initiale \mathbf{x}_0 et un critère d’arrêt ε .

Réultat : trajectoire du modèle entre t_0 et t_1 : \mathbf{x}

Initialisation $\mathbf{x}^{b,0}(t_0) = \mathbf{x}_0$, $n = 0$, $\delta = +\infty$;

while $n < n_{max}$ ou $\delta > \varepsilon$ **do**

 1. Intégration du nudging direct :

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{f,n}(t_0) = \mathbf{x}^{b,n}(t_0) \\ \frac{\partial \mathbf{x}^{f,n}}{\partial t} = \mathcal{M}^f(\mathbf{x}^{f,n}) - K(\mathcal{H}(\mathbf{x}^{f,n}) - \mathbf{y}^o) , \quad t_0 \leq t \leq t_1 \end{cases} \quad (2.19)$$

 2. Intégration du nudging rétrograde :

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{b,n}(t_1) = \mathbf{x}^{f,n}(t_1) \\ \frac{\partial \mathbf{x}^{b,n}}{\partial t} = \mathcal{M}^b(\mathbf{x}^{b,n}) + K(\mathcal{H}(\mathbf{x}^{b,n}) - \mathbf{y}^o) , \quad t_1 \geq t \geq t_0 \end{cases} \quad (2.20)$$

 3. Calcule du critère de convergence. Par exemple : $\delta = ||\mathbf{x}^{f,n} - \mathbf{x}^{f,n-1}||$, pour $n > 0$.

 4. $n \leftarrow n + 1$

end

$\mathbf{x} = \mathbf{x}^{f,n-1}$

Approche variationnelle

Le problème d'inversion est formulé de façon variationnelle. Lorsque la distribution temporelle des observations est prise en compte, on parle de 4Dvar (pour *four dimensional variational*). Généralement, le 4Dvar cherche à déterminer l'état initial \mathbf{x}_0 du système qui minimise la fonction coût J définie par :

$$J(\mathbf{x}_0) = \overbrace{(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^b)^T B^{-1} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^b)}^{J^b} + \overbrace{\sum_{i=0}^N (\mathbf{y}_i^o - H_i \mathbf{x}_i)^T R_i^{-1} (\mathbf{y}_i^o - H_i \mathbf{x}_i)}^{J^o} \quad (2.21)$$

Deux termes apparaissent dans l'expression de J :

- J^o mesure l'écart entre la trajectoire du système et les observations. Les statistiques d'erreur sont représentées par les matrices R_i . L'état \mathbf{x}_i , centré autour du temps t_i , est tel que $\mathbf{x}_i = \mathcal{M}_{0,i}(\mathbf{x}_0)$. On note $\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i^o - H_i \mathcal{M}_{0,i}(\mathbf{x}_0)$ le vecteur d'innovation.
- J^b est le terme d'ébauche permettant de régulariser le problème d'inversion pour pallier au manque d'observations. \mathbf{x}_0^b est un état initial du système a priori, issu d'un modèle, d'une climatologie ou d'une première estimation et B est la matrice de covariance associée.

Notons que l'ensemble de la physique sous-jacente au problème d'inversion est contenue dans la définition de J .

La minimisation de J est réalisée en cherchant le zéro de son gradient :

$$\nabla J(\mathbf{x}_0) = 0 \quad (2.22)$$

où

$$\nabla J(\mathbf{x}_0) = 2B^{-1}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^b) - 2 \sum_{i=0}^N M_{i,0}^* H_i^T R_i^{-1} \mathbf{d}_i \quad (2.23)$$

M^* est appelé adjoint du modèle \mathcal{M} , équivalent à M^T dans le cas où \mathcal{M} est linéaire. $(\cdot)^T$ est l'opérateur de transposition. Dans le cas où le modèle \mathcal{M} est non linéaire, on recourt au modèle linéaire tangent L défini autour d'un état \mathbf{x} donné et on a $M^* = L^T$. Le calcul de ∇J^o s'obtient par intégration rétrograde du modèle adjoint, forcé par les vecteurs d'innovation \mathbf{d}_i :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_N^* = H_N^T R_N^{-1} \mathbf{d}_N \\ \mathbf{x}_i^* = M_{i+1,i}^* \mathbf{x}_{i+1}^* + H_i^T R_i^{-1} \mathbf{d}_i, \quad i = N-1, 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

\mathbf{x}_i^* est la variable adjointe au temps t_i et $\nabla J^o = \mathbf{x}_0^*$.

L'algorithme du 4Dvar, qui combine le modèle direct (équation 2.15) et le modèle adjoint (équation 2.24) dans un processus itératif est décrit dans l'algorithme 2.

Algorithme 2 : Itérations du 4Dvar. λ est le pas de l'algorithme de descente de gradient, calculé par une règle de recherche linéaire sur J le long de la direction $-\nabla J$; n_{max} est le nombre d'itérations maximal ; \mathbf{x}_0 est une condition initiale et ε est un critère d'arrêt.

Résultat : trajectoire du modèle entre t_0 et t_1 : \mathbf{x}

Initialisation $\widehat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{x}_0$, $n = 0$;

while $\|\nabla J\| > \varepsilon$ ou $n < n_{max}$ **do**

1. Intégration du modèle \mathcal{M} (équation 2.15) à partir de $\widehat{\mathbf{x}}_0$. Les vecteurs d'innovation \mathbf{d}_i sont sauvegardés;
2. Si \mathcal{M} est non linéaire, le modèle linéaire tangent à $\widehat{\mathbf{x}}_0$ est dérivé;
3. Calcule de $\nabla J(\widehat{\mathbf{x}}_0)$ en intégrant le modèle adjoint M^* forcé par les vecteurs d'innovation \mathbf{d}_i (équation 2.24);
4. Algorithme de descente de gradient : $\widehat{\mathbf{x}}_0 \leftarrow \widehat{\mathbf{x}}_0 - \lambda \nabla J(\widehat{\mathbf{x}}_0)$;
5. $n \leftarrow n + 1$.

end

Calcul de la trajectoire $\mathbf{x}_i = \mathcal{M}_{0,i}(\widehat{\mathbf{x}}_0)$ en intégrant le modèle \mathcal{M}

En plus ou à la place de la condition initiale \mathbf{x}_0 , l'algorithme du 4Dvar offre la possibilité d'estimer un jeu de paramètres du modèle, $\xi = \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_p\}$, pour adapter la dynamique simulée par le modèle aux observations. On pense notamment aux conditions aux limites du modèle, à des paramètres intervenant directement dans les équations de propagation (H_e dans les équations 2.12, par exemple) ou à des termes que l'on introduit dans les équations de propagation afin de compléter la dynamique simulée par le modèle. La nouvelle fonction coût s'écrit alors :

$$J(\mathbf{x}_0, \xi) = J^b(\mathbf{x}_0) + J^b(\xi) + J^o(\mathbf{x}_0, \xi) \quad (2.25)$$

Notons que les modèles linéaire tangent et adjoint doivent être dérivés par rapport à \mathbf{x}_0 et ξ pour calculer $\nabla J^o(\mathbf{x}_0, \xi)$.

2.2.3 Réduction d'ordre

La réduction d'ordre est une pratique usuelle en assimilation de données dans le cadre de problèmes de grande dimension pour réduire le nombre de degrés de liberté du système d'étude tout en conservant les caractéristiques principales des schémas d'assimilation. L'idée est de projeter le vecteur d'état dans un espace réduit composé d'un nombre de degrés de liberté très inférieur au nombre initial. En effet, bien que les équations régissant la dynamique des fluides géophysiques soient très complexes, les variables du système ne sont

pas toutes indépendantes les unes des autres. On peut alors extraire des modes de variabilité qui connectent les variables du système entre elles. La réduction d'ordre consiste à ne garder que les modes les plus énergétiques, i.e. qui impactent le plus la dynamique.

En pratique, la réduction d'ordre consiste à exprimer l'état du système \mathbf{x} dans une base réduite de dimension r inférieure à la dimension du système :

$$\mathbf{x} = \sum_{i=0}^{r-1} \lambda_i \mathcal{G}_i = G\lambda \quad (2.26)$$

où $\lambda = \{\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{r-1}\}$ sont les coordonnées de \mathbf{x} dans la base réduite définies par les fonctions \mathcal{G}_i , appelées fonctions de forme. G est la matrice dont la ligne i est remplie par les composantes de \mathcal{G}_i dans l'espace d'état. La nature de ces fonctions est choisie pour respecter les propriétés physiques du système. En pratique, ces fonctions de forme peuvent être des EOF, des ondelettes, des modes de Fourier, des fonctions de Gauss etc. Le processus de minimisation s'opère dans cet espace réduit et consiste à minimiser une nouvelle fonction coût \tilde{J} telle que :

$$J(\mathbf{x}) = \tilde{J}(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{r-1}) \quad (2.27)$$

\tilde{J} et $\nabla \tilde{J}$ s'expriment de la même manière que dans les équations 2.21 et 2.23, avec les modèles directe et adjoint tels que : $\tilde{\mathcal{M}} = \mathcal{M} \cdot G$ et $\tilde{M}^* = G^T \cdot M^*$.

2.3 Stratégies expérimentales

Afin d'évaluer et comparer les performances des outils de cartographie de SSH, nous devons définir des cadres d'expérience adaptés aux observations utilisées et aux problématiques énoncées. Le cas d'observations simulées est traité dans la première partie. La seconde partie traite des observations réelles. Dans la troisième partie, nous introduisons quelques diagnostics pour l'évaluation des performances.

2.3.1 Observations synthétiques

Afin d'évaluer les performances des méthodes d'assimilation de données ou de tester l'impact d'un nouveau réseau d'observation sur la qualité des produits de niveaux supérieurs (niveaux L3 ou L4), comme c'est le cas pour le satellite SWOT qui n'est pas encore lancé, il est usuel de mettre en place un cadre expérimental particulier appelé OSSE (pour *Observing Simulation System Experiment*; Figure 2.3). Dans le cadre d'une OSSE, on utilise une simulation numérique, appelée simulation de référence, qui fournit l'état de référence à

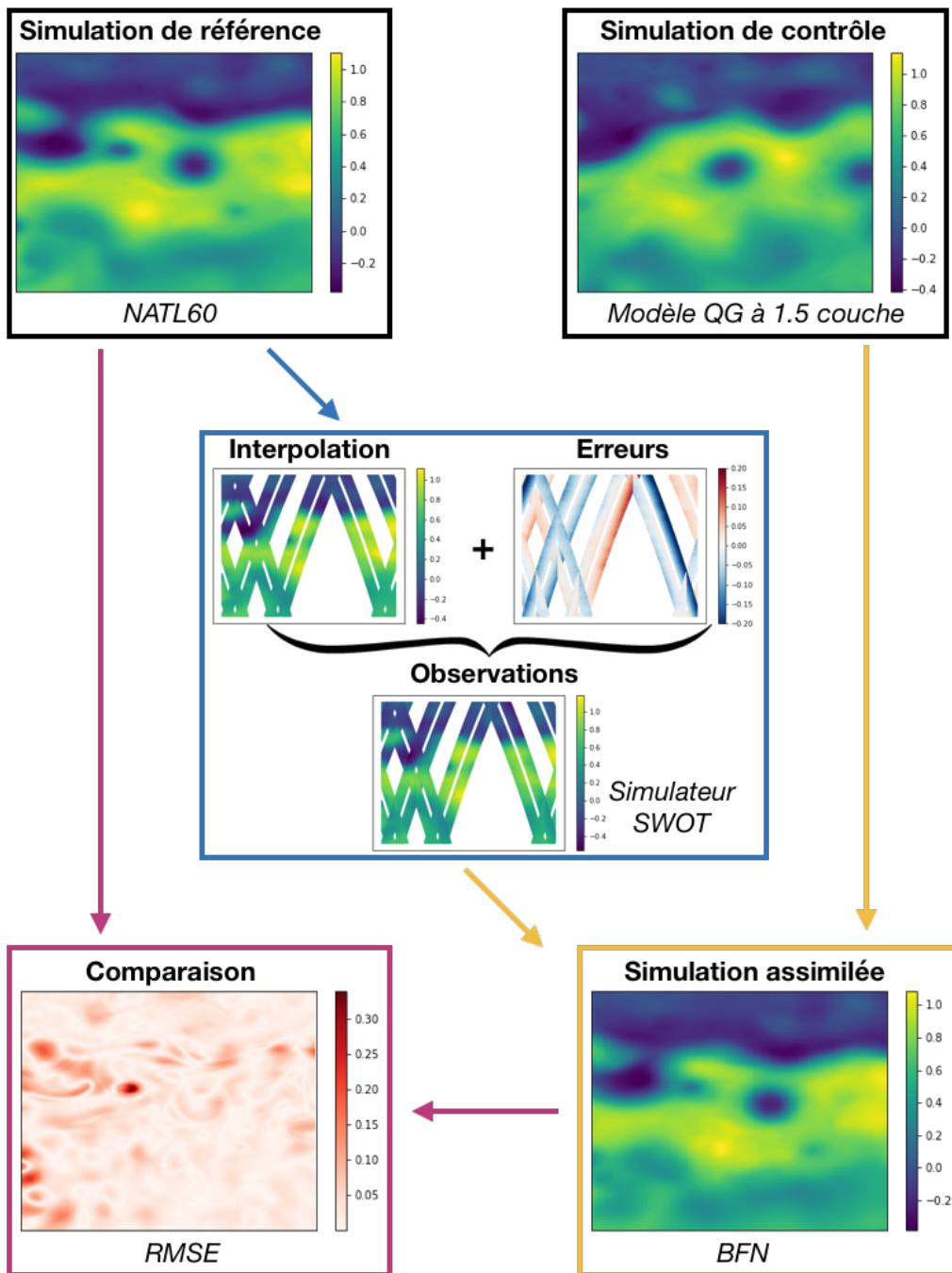


FIGURE 2.3 Schéma d'une OSSE (les boîtes sont des données et les flèches des processus), illustrée par le contexte expérimental mis en place au chapitre 3 : la simulation (en haut à gauche) NATL60, centrée sur une région du Gulf Stream, est considérée comme l'état vrai de l'océan ; le simulateur SWOT est appliqué aux champs de SSH pour extraire des observations simulées (au centre ; dans cette thèse, les erreurs seront ignorées) ; les observations sont assimilées dans un modèle QG à une couche et demie par la méthode du BFN (en bas à droite) ; les champs reconstruits sont par la suite comparés (notamment grâce au calcul d'RMSEs, cf. la section 2.3.3) au champs de référence pour évaluer les performances de la cartographie.

reconstruire. À partir de cette simulation et des paramètres instrumentaux (orbite et erreurs de mesures), on extrait des observations. Ces observations synthétiques (on parle aussi de *pseudo-observations*) sont assimilées dans un modèle dynamique (appelé simulation de contrôle) grâce à une méthode d'assimilation de données. L'état estimé du système est ensuite comparé à la référence.

Dans cette thèse, nous utiliserons des simulations numériques de différentes natures pour simuler l'état de l'océan. Dans le chapitre 3, nous utiliserons une configuration pour l'atlantique nord du modèle océanique NEMO, appelée NATL60, qui offre une résolution horizontale sans précédent de $1/60^\circ$ avec 300 niveaux verticaux, résolvant ainsi la dynamique de sous-mésoéchelle. Dans le chapitre 5, nous utiliserons une configuration idéalisée du modèle CROCO qui simule la propagation du premier mode barocline d'une composante de marée interne au travers d'un champ de turbulence équilibrée. Dans le chapitre 6, nous utiliserons la configuration globale llc4320 du modèle MITgcm qui fournit une vue réaliste des dynamiques équilibrée et de marée interne et leurs interactions complexes à des résolutions spatiales et temporelles sans précédent pour une configuration à l'échelle globale.

Les observations simulées seront extraites des modèles de référence de différentes manières. Un simulateur a été développé pour générer des observations altimétriques (SWOT et nadirs) avec une estimation des erreurs (Gaultier et al., 2015). Pour une orbite et un modèle donnés, les champs SSH du modèle sont interpolés sur les traces altimétriques. Les erreurs sont ensuite estimées et ajoutées au signal océanique. Pour SWOT, ces erreurs Dans le chapitre 3, nous utiliserons ce simulateur, sans estimation des erreurs, pour extraire des fauchées SWOT de son orbite scientifique ainsi que les traces de quatre altimètres nadirs. Dans le chapitre 5, nous évoluerons dans un contexte idéalisé où les observations sont des observations complètes en espace, régulièrement espacées dans le temps, sans erreur de mesure. Dans le chapitre 6, nous utiliserons aussi le simulateur SWOT mais cette fois-ci en considérant l'orbite Cal/Val de SWOT.

2.3.2 Observations réelles

Après avoir été testées et optimisées grâce à des OSSEs, les performances des algorithmes de cartographie peuvent être validées sur un réseau d'observations réelles dans un cadre expérimental que l'on appelle OSE (pour *Observing System Experiment*). À l'inverse des OSSEs, nous ne connaissons pas l'état de référence de l'océan en OSEs, car il s'agit de l'océan réel.

Les stratégies pour évaluer les performances des algorithmes de cartographie en OSE reposent sur la comparaison des cartes de SSH avec des observations indépendantes, i.e. qui sont absentes du réseau d'observation sur lequel les algorithmes sont appliqués. Une

stratégie est de retirer un altimètre du réseau d'observation pour comparer directement la SSH cartographiée à la SSH mesurée par cet altimètre. En pratique, il est usuel de retirer l'altimètre qui fournit les mesures de meilleure qualité, afin de diminuer l'effet des erreurs de mesure sur l'évaluation des performances. On peut aussi considérer des observations indépendantes qui mesurent d'autres variables que la SSH. Par exemple, il est usuel de comparer les courants géostrophiques dérivés des cartes de SSH avec les courants mesurés par des bouées dérivantes (*drifters* en anglais). Cependant, cette tâche est délicate car les *drifters* ne mesurent pas seulement la composante géostrophique des courants, mais aussi la composante d'Ekman forcée par les vents et la contribution des ondes de gravité. Cette illustration montre toute la difficulté de l'évaluation dans le cadre de données réelles, notamment pour des quantités non ou mal observées.

Dans le chapitre 3, nous évaluerons les performances du BFN pour cartographier la composante équilibrée de la SSH à partir des produits altimétriques L3 distribués par CMEMS. Nous regarderons tout particulièrement la capacité du BFN à estimer les courants géostrophiques.

2.3.3 Métriques

L'évaluation des performances consiste à calculer des diagnostics qui mesurent les différences entre les champs de SSH reconstruits et une référence décrivant avec plus ou moins de justesse la réalité. Dans le cas des OSSEs, la référence est une simulation qui fournit des champs de SSH sur une grille 2D, à des intervalles de temps réguliers. Dans le cas des OSEs, la référence est fournie par des observations indépendantes (entachées d'erreurs de mesures) qui sont généralement distribuées de manière inhomogène dans le temps et l'espace. Dans la suite, on note $\hat{\mathbf{x}}$ et \mathbf{x}_r les champs reconstruit et de référence. En pratique, \mathbf{x} représente la SSH ou les courants géostrophiques.

Ces diagnostics sont définis selon des métriques précises. Le choix des métriques est critique pour permettre aux diagnostics de valider les performances selon certaines exigences. Par exemple, les exigences peuvent concerner des objectifs de résolution spatiale et/ou temporelle.

Une première métrique utilisée tout au long de cette thèse est la RMSE (pour *Root Mean Square Error*) qui est sensible au mauvais positionnement des structures physiques, comme les tourbillons par exemple, qu'importe leurs échelles spatiales ou temporelles. On a :

$$RMSE = \sqrt{\int (\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_r)^2} \quad (2.28)$$

Dans l'équation 2.28, l'intégrale \int représente une espérance spatiale, temporelle, ou spatio-temporelle.

Une seconde métrique est la PSD (pour *Power Spectral Density*) qui mesure les niveaux d'énergie d'un signal en fonction de ses échelles spatiales et/ou temporelles. La PSD est égale au carré du module de la transformée de Fourier du signal. Notons que la transformée de Fourier est définie pour des signaux avec une fréquence d'échantillonnage constante. Par conséquent, l'évaluation de la PSD en fonction des échelles temporelles ne pourra être réalisée qu'en OSSE.

À la différence de la RMSE qui mesure directement l'écart entre les champs reconstruit et de référence, la PSD est propre à un champ particulier. Par contre, la comparaison peut se faire en calculant la PSD de l'erreur $\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_r$. En pratique, on calculera le score suivant :

$$R = 1 - \frac{PSD(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_r)}{PSD(\mathbf{x}_r)} \quad (2.29)$$

Pour une certaine échelle spatiale et/ou temporelle, un score égal à 1 signifie que la reconstruction est parfaite tandis qu'un score égal à 0 signifie qu'aucune corrélation n'existe entre le champ reconstruit et le champ de référence. De plus, il est usuel de définir la résolution spatiale (temporelle) du champ reconstruit comme l'échelle spatiale (temporelle) au dessus de laquelle $R > 0.5$.

Chapitre 3

Cartographie altimétrique haute résolution de la dynamique équilibrée dans le contexte de la mission SWOT

3.1 Résumé

Dans ce chapitre, nous insérons un article (section 3.2) et un document rassemblant des résultats supplémentaires (section 3.3) publiés dans la revue *Journal of atmospheric and oceanic technology*.

Cet article présente la mise en oeuvre d'une méthode originale d'assimilation de données – le Back and Forth Nudging (BFN ; cf. la section 2.2.2 du chapitre 2) – avec un modèle Quasi-Geostrophique (QG) à une couche et demie (cf. la section 2.1.2 du chapitre 2) pour cartographier dynamiquement la composante équilibrée de la SSH à partir d'observations altimétriques. Cette méthode est dénommée BFN-QG dans la suite du manuscrit.

Le BFN-QG est testé en OSSE (cf. la section 2.3.1 du chapitre 2) où la vérité est produite par une simulation à haute résolution (NATL60) et les observations altimétriques (SWOT et nadirs) sont extraites sur une région du Gulfstream en considérant des échantillonnages spatio-temporels réalistes. Nous considérons plusieurs scénarios d'observation : SWOT seul, quatre nadirs seuls, SWOT et les quatre nadirs ensembles. Aucune erreur de mesure n'est considérée dans cette étude, mais une formulation alternative du BFN-QG pour réduire l'impact des erreurs spatialement corrélées dans les données SWOT est présentée. Les cartes produites par le BFN-QG sont systématiquement comparées à celles du système DUACS, ce dernier étant appliqué sur les mêmes réseaux d'observation. Une série de diagnostics statistiques et

spectraux est appliquée pour évaluer les performances du BFN-QG en comparaison à celles du système DUACS.

Les résultats montrent que le BFN-QG permet de réduire substantiellement les erreurs de cartographie comparé au système DUACS. Cette réduction est d'autant plus prononcée en combinant les données nadirs et SWOT (la résolution effective des cartes est améliorée de 40km en comparaison aux produits DUACS). Les données nadirs se révèlent nécessaires pour contraindre les grandes échelles spatiales lorsque celles-ci sont polluées par des erreurs spatialement corrélées dans les données SWOT. Les résultats supplémentaires (section 3.2) montrent une grande robustesse des performances du BFN-QG aux changement de région et de saison d'étude. En particulier, l'intensité de la dynamique équilibrée ne semble pas impacter les performances.

Bien que ces résultats soient très encourageants pour la problématique de la cartographie haute résolution des données SWOT, ils méritent d'être validés avec des observations réelles. C'est l'objet du chapitre suivant.

3.2 Article 1 : Mapping Altimetry in the Forthcoming SWOT Era by Back-and-Forth Nudging a One-Layer Quasi-geostrophic Model

❸ Mapping Altimetry in the Forthcoming SWOT Era by Back-and-Forth Nudging a One-Layer Quasigeostrophic Model❸

FLORIAN LE GUILLOU,^a SAMMY METREF,^a EMMANUEL COSME,^a CLÉMENT UBELMANN,^b MAXIME BALLAROTTA,^c JULIEN LE SOMMER,^a AND JACQUES VERRON^b

^a Université Grenoble Alpes, CNRS, IRD, Grenoble INP, IGE, Grenoble, France

^b Ocean Next, Grenoble, France

^c Collecte Localisation Satellites, Ramonville-Saint-Agne, France

(Manuscript received 29 June 2020, in final form 29 September 2020)

ABSTRACT: During the past 25 years, altimetric observations of the ocean surface from space have been mapped to provide two dimensional sea surface height (SSH) fields that are crucial for scientific research and operational applications. The SSH fields can be reconstructed from conventional altimetric data using temporal and spatial interpolation. For instance, the standard Developing Use of Altimetry for Climate Studies (DUACS) products are created with an optimal interpolation method that is effective for both low temporal and low spatial resolution. However, the upcoming next-generation SWOT mission will provide very high spatial resolution but with low temporal resolution. The present paper makes the case that this temporal–spatial discrepancy induces the need for new advanced mapping techniques involving information on the ocean dynamics. An algorithm is introduced, dubbed the BFN-QG, that uses a simple data assimilation method, the back-and-forth nudging (BNF), to interpolate altimetric data while respecting quasigeostrophic (QG) dynamics. The BFN-QG is tested in an observing system simulation experiments and compared to the DUACS products. The experiments consider as reference the high-resolution numerical model simulation NATL60 from which are produced realistic data: four conventional altimetric nadirs and SWOT data. In a combined nadir and SWOT scenario, the BFN-QG substantially improves the mapping by reducing the root-mean-square errors and increasing the spectral effective resolution by 40 km. Also, the BFN-QG method can be adapted to combine large-scale corrections from nadir data and small-scale corrections from SWOT data so as to reduce the impact of SWOT correlated noises and still provide accurate SSH maps.

KEYWORDS: Sea/ocean surface; Altimetry; Data assimilation

1. Introduction

Gridded maps of sea surface height (SSH) are widely used to study mesoscale ocean dynamics and their impact on global climate (Morrow and Le Traon 2012). SSH maps enable the tracking of mesoscale eddies (Chelton et al. 2011) and the study of their variability in space and time (Pascual et al. 2006). This leads to better quantification of the transport of kinetic energy, heat, and salt, which are to a large extent driven by mesoscale eddies (Fu et al. 2010). SSH maps make it possible to quantify sea level rise at global and regional scales (Ablain et al. 2017), are also used for operational monitoring of the marine environment (von Schuckmann et al. 2018) and are fundamental for data-driven reconstructions of the 3D dynamics as those provided by the Copernicus service (e.g., Mulet et al. 2012; Buongiorno Nardelli 2020).

The most commonly used SSH maps, the Developing Use of Altimetry for Climate Studies (DUACS) products, are derived from a statistical space–time interpolation of nadir altimeter observations. This intrinsically limits the effective resolution [as defined in Skamarock (2004), i.e., the fully resolved scales] of DUACS SSH maps to 150–200 km at middle latitudes (Ballarotta et al. 2019). The SSH mapping algorithm was developed by CNES and CLS in 1997, as part of the DUACS project, and has been continuously improved since then (Taburet et al. 2019). The DUACS products are now distributed by the Copernicus Marine Environment Monitoring Service (CMEMS). DUACS algorithm implements a statistical interpolation of SSH satellite data in space and time to produce global daily maps (Le Traon et al. 1998). The data are collected by a constellation of 2 to 4 nadir-looking altimeters (sometimes referred to as conventional altimeters), and characterized by large data gaps reaching 200 km in the zonal direction at the equator.

The Surface Water and Ocean Topography (SWOT; Fu et al. 2012; Morrow et al. 2019) altimetry mission, to be launched in early 2022, will open the way to SSH maps with resolution significantly higher than 150 km at midlatitudes, but this perspective entails a thorough revisit of the mapping algorithm. SWOT will considerably increase the measurement density at the surface of the oceans thanks to SSH measurements at a kilometric pixel resolution over a swath 120 km wide. On the swath, SWOT is expected to resolve scales down to 15 km at low latitude and 30–45 km at mid- and high

❸ Denotes content that is immediately available upon publication as open access.

📎 Supplemental information related to this paper is available at the Journals Online website: <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-20-0104.s1>.

Corresponding author: Florian Le Guillou, florian.leguillou@univ-grenoble-alpes.fr

latitudes (Wang et al. 2019). In its science phase, SWOT will have a 21 days repeat orbit, allowing an average revisit time of 11 days in most of the globe. Some of the dynamical processes observable by SWOT evolve over time scales on the order of 1 day, much shorter than the satellite revisit time. Consequently, the mapping method implemented in the current DUACS system will certainly not be sufficient to draw the maximum benefit from SWOT. A linear interpolation will filter most of the observed small-scale signals between two passes of the satellite, as anticipated by Gaultier et al. (2016). These authors advocate for using more advanced methods to build SSH maps.

One particularly appealing option to derive SSH maps from SWOT and nadir altimetry is to introduce information on ocean dynamics in the mapping algorithm or, worded differently, combine altimetry and a numerical model of the ocean dynamics using some data assimilation technique. The model provides a full, 2D gridded representation of SSH, though not always consistent with observations. In a data assimilation process, it acts as a physical interpolator or extrapolator of observations in space and time. Data assimilation aims at melding model data and observations to produce full, 2D gridded SSH maps consistent with observations and model dynamics at once. Assimilation methods exhibit a wide range of complexity and diversity of applications. The method often referred to as the simplest one is nudging (Anthes 1974). Nudging consists of introducing an extra term in the model prognostic equations, to elastically pull the simulated variables toward the observations. Several pioneering experiments of altimetry assimilation actually started with nudging (e.g., Holland and Malanotte-Rizzoli 1989; Verron 1990, 1992; Blayo et al. 1994). Much more advanced assimilation methods exist to efficiently assimilate altimetric data in complex, general circulation models (e.g., Leeuwenburgh 2005; Martin et al. 2007; Lea et al. 2008; Wan et al. 2010; Storto et al. 2011). These methods are often designed to estimate the full, 3D and multivariate state of the ocean, and tend to be computationally expensive. A belief shared among the authors and driving the choices of tools for this work is that the best method is the one that best responds to the problem posed, and this is not always the most sophisticated one.

The relevance of using a simpler dynamical framework has been shown in Ubelmann et al. (2015). Although the model considered is representing a very reduced dynamic (based on the conservation of potential vorticity), the quasigeostrophic (QG) dynamical framework is able to capture a large part of the mesoscale dynamics for small Rossby numbers (Vallis 2006). As a proof of concept, Ubelmann et al. (2015) reconstructed the trajectory between two SSH fields 10 days apart from each other by averaging a model forward run (initialized by the first snapshot) and a backward run (initialized by the second snapshot). They show a significant improvement of the two dimensional reconstruction of SSH fields compared with a linear interpolation (such as the one implemented in the DUACS system). The method was then successfully applied with synthetic nadir altimeter data (Ubelmann et al. 2016) and finally in a more operational context with real data (Ballarotta et al. 2020).

Motivated by the conclusions drawn in this series of papers, we investigate an algorithm, dubbed the BFN-QG, based on a 1.5-layer QG model and a data assimilation method called the back-and-forth nudging (BFN; Auroux and Blum 2008) to create high-resolution SSH maps from nadir and SWOT altimetry. The goal of the studied algorithm is to apply a QG dynamical constraint to the data interpolation, using a conceptually simple and computationally reasonable data assimilation smoothing method. The standard nudging method adds to the model equations a feedback term which is a tunable nudging coefficient multiplied by the difference between the observation and the equivalent model quantity (Hoke and Anthes 1976). The backward nudging applies the same procedure on the backward-in-time model equations and the nudging term with opposite sign. The BFN iteratively combines the standard and the backward nudging to provide a smoothing over a time period of the best fit to the observations under the dynamical constraint (Auroux and Blum 2008). In the present application, the QG model can be seen as a weak constraint to the altimetric data interpolation.

The goal of this paper is to evaluate the SSH mapping abilities of the BFN-QG in comparison with the interpolation method, presently used in DUACS, with conventional altimetry and SWOT data. The methods are tested with simulated altimetric observations realistically distributed in space and time using an observing system simulation experiments (OSSE) approach. The reference simulation (Nature Run) is a very high-resolution ocean simulation of the North Atlantic (NATL60; Molines 2018) from which simulated SSH observations are built considering four nadir and one SWOT-like virtual altimeter sampling along realistic orbits. The focus is made on one region of the Gulf Stream characterized by strong mesoscale dynamics. Three observational scenarios are investigated: the four nadirs only (Nadirs), the SWOT data only (SWOT) and the combination of the four nadirs and the SWOT data (Nadirs + SWOT). For the SWOT data, in the latter two scenarios, an alternative implementation of the BFN-QG where the nudging is applied to the relative vorticity only—named SWOT(ξ) in opposition to the standard nudging on the potential vorticity SWOT(q) that includes both relative vorticity and vortex stretching—is also investigated in anticipation of possibly strong correlated SWOT errors. This alternative implementation is expected to reduce the impact of correlated SWOT errors on the SSH reconstruction. In each case, a systematic comparison with the DUACS products (made from the same synthetic dataset) is carried out to evaluate the relative performance of the new mapping technique in terms of accuracy and spectral resolution.

The paper is structured as follows. Section 2 details the data assimilation method, from the theoretical aspects to the strategical implementation. Section 3 presents the experimental design, based on OSSE, to assess the ability of the BFN-QG to derive SSH maps from SWOT and nadir altimetry. In section 4, we evaluate the performances of the BFN-QG technique in comparison with DUACS products. Conclusions and perspectives are drawn in section 5.

2. Data assimilation technique

a. Dynamical model

In Ubelmann et al. (2015), the authors have shown the relevance of PV conservation as a weak dynamical constrain to propagate high-spatial-resolution SSH data in time. Thus, we decide to use the same QG model as in Ubelmann et al. (2015) to dynamically propagate in space and time the altimetric data. The model considers 1.5 layers and no atmospheric forcing. The reconstructed circulation is then the combination of observations, QG dynamics, and boundary conditions only. Note that the collapse of energy due to numerical dissipation and the absence of atmospheric forcing is compensated by data assimilation.

The adiabatic QG dynamics in the 1.5-layer model are governed by the conservation of PV, q (Vallis 2006):

$$\frac{\partial q}{\partial t} + J(\psi, q) = 0, \quad (1)$$

where J is the Jacobian operator and the streamfunction ψ is proportional to SSH:

$$\psi = \frac{g}{f} \text{SSH}, \quad (2)$$

with g the gravity constant, and f the Coriolis parameter. The PV is linked to the streamfunction by the elliptical equation:

$$q = \nabla^2 \psi - \frac{1}{L_R^2} \psi, \quad (3)$$

where ∇^2 is the Laplace operator and L_R is the first baroclinic Rossby radius of deformation.

A few properties of the QG model are worth being emphasized to anticipate the assimilation methodology. Two terms appear in the expression of PV. The first one ($\nabla^2 \psi$), called the relative vorticity (ξ), is the vorticity of the fluid as viewed in the rotating frame of Earth. The second one ($-1/L_R^2 \psi$), called vortex stretching, describes the mechanism of stretching of the fluid columns. There is an interplay between these two terms in the conservation of PV. The length scale on which relative vorticity and vortex stretching make equal contributions to PV is the first baroclinic Rossby radius of deformation L_R . The value of L_R varies geographically (Chelton et al. 1998). It depends on Earth rotation, stratification, and water depth. We will see in section 2c that, depending on the type of sensor, one part, the other part, or the totality of the PV can be observed and therefore assimilated.

The time stepping from time t_i to t_{i+1} is implemented as follows. First, the streamfunction ψ_i is computed by Eq. (2) and PV q_i is diagnosed from Eq. (3). Then Eq. (1) is integrated in time to get q_{i+1} . Finally, ψ_{i+1} (and therefore SSH_{i+1}) is obtained by inverting the elliptical Eq. (3) using a gradient conjugate technique.

b. The BFN algorithm

The nudging technique is a conceptually simple data assimilation method first employed in the meteorological context (Hoke and Anthes 1976). It consists in adding a feedback term

to the prognostic equation of the model. The feedback term is proportional to the difference between the observations and the state of the model. In our study, the prognostic equation is Eq. (1) and the state variable of the model is PV, q . To make the method description clear, we rewrite this equation as follows:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \mathcal{M}(X, t), \quad (4)$$

where X is the state variable (here, PV) and \mathcal{M} represents the physics of the model (here, the advection of PV by the surface flow).

Now, let us assume that observations Y^{obs} of the model state are available in the time window $[0, T]$. These observations can be used to nudge the model, i.e., pull the state toward the observed trajectory.

1) FORWARD NUDGING

Assuming the initial state of the model X_0 is given, the forward nudging consists in resolving the system

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = \mathcal{M}(X, t) + K(Y^{\text{obs}} - X), & 0 \leq t \leq T \\ X(0) = X_0 \end{cases}, \quad (5)$$

where K , called the nudging coefficient, has the dimension of the inverse of time. The value of K determines the strength of the relaxation: the higher the value, the more the observation will impact the trajectory of the model.

2) BACKWARD NUDGING

Now, we assume that the initial condition is replaced by a final condition X_T . In our QG model, no irreversible phenomena, such as mixing, have been considered. It is therefore possible to propagate the model backward in time. In contrast to the forward nudging, the feedback term is added with an opposite sign (Auroux and Blum 2008):

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = \mathcal{M}(X, t) - K(Y^{\text{obs}} - X), & T \geq t \geq 0 \\ X(T) = X_T \end{cases}. \quad (6)$$

3) BFN ALGORITHM

The BFN is the iterative combination of the forward nudging and the backward nudging over the time interval $[0, T]$. Assuming the initial state of the model is given, the forward nudging is first computed. The final state obtained by the forward propagation is then used as initial condition to run the backward nudging. The algorithm converges in several iterations toward a trajectory that both fits the observations and complies with the model dynamics (e.g., a maximum of 10 iterations were used in the following numerical experiments). This data assimilation method shares analogies with four-dimensional variational (4DVar) assimilation, in that both solve the problem of finding a model trajectory over a fixed-time interval, which best fits observations within this interval. The implementation of the BFN

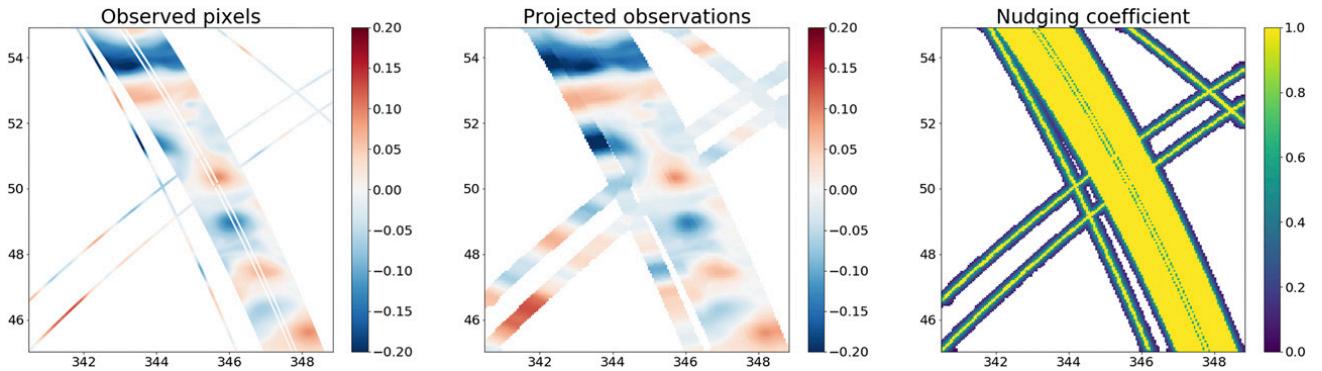


FIG. 1. (left) Available SSH (in m) measured by four nadir altimeters and SWOT in a $10^\circ \times 10^\circ$ region over a specific assimilation time window; (center) spatial influence of these observations; (right) related nudging term. White regions indicate (left) the absence of observations and (center), (right) the absence of nudging term.

is easier because it does not require the minimization tools needed by the 4DVar.

c. Nudging strategy

The nudging technique is relatively easy to implement if the assimilated data are direct observations of the prognostic variables, or if they can be conveniently projected onto the state space. Indeed, in Eqs. (5) and (6), the terms Y^{obs} and X (which refer, respectively, to the observations and to the prognostic variable) have to be of the same nature to be comparable. Depending on the state variable and the type of observations available, it is sometime necessary to use physical considerations to transform the observation or the state variable and compute the nudging term. For instance, in the adiabatic QG framework, the prognostic variable is PV, which is not directly observable. As mentioned previously, PV is the sum of two terms: the relative vorticity ($\nabla^2\psi$ term) and the vortex stretching ($-1/L_R^2\psi$ term).

In this study, the data to be nudged in the QG model are provided by conventional along-track (nadir) and SWOT SSH data.

Three possible options are then to nudge the full PV, which requires the computation of relative vorticity $\nabla^2\text{SSH}$ from the observations, or to restrict the nudging to the vortex stretching component or to the relative vorticity component.

In this work, the nudging from nadir altimetry data is restricted to the vortex stretching component. These data being distributed along one-dimensional tracks, the two dimensional Laplace operator cannot be applied as is. Verron (1990) overtook this issue by assuming the relative vorticity to be isotropic. In this case, the Laplace operator reduces to $2\partial^2/\partial^2 s$ where s is the along-track coordinate. Verron (1992) showed that nudging the relative vorticity is comparable to nudging SSH toward nadir altimetry measurements. To keep the formulation as simple as possible and save algorithm complexity, we implement the nudging toward SSH only.

With SWOT data, nudging is carried out with both relative vorticity and vortex stretching. Nudging the model full PV is possible, or the two PV components separately. An experiment motivated in section 3c actually implements the nudging of

relative vorticity only. The general form of the nudging term to be added to the prognostic Eq. (1) can be written as

$$K(Y^{\text{obs}} - X) = -\frac{1}{L_R^2} K_{\text{SSH}} \left(\frac{g}{f} \text{SSH}^{\text{obs}} - \psi \right) + K_\xi \left[\nabla^2 \left(\frac{g}{f} \text{SSH}^{\text{obs}} \right) - \nabla^2(\psi) \right], \quad (7)$$

where SSH^{obs} is the observed SSH, ψ the streamfunction of the model, L_R the Rossby radius, g the gravitational constant and f the Coriolis parameter; K_{SSH} and K_ξ are the nudging coefficients, to be adjusted. This formula holds for nadir observations, with $K_\xi = 0$.

The abrupt nudging toward observations that are discrete in time and discontinuous in space can either generate strong gradients, leading to numerical instabilities, or apply a too-weak constraint on the model, leading to the absence of observational constraints. A common recipe to tackle this issue is to extend the space–time domain of influence of each observation (Ruggiero et al. 2015).

To compute the nudging terms (one for SWOT, one for nadir data), the observations are grouped together in assimilation time windows (one hour in this study). For each window presenting observations, the observation used to compute the nudging term (relative to SWOT or nadir data) at a model grid point is made from a weighted average of all observations occurring in the assimilation time window and within a spatial influence radius D (to be prescribed). The weights are computed with the Gaspari–Cohn function (Gaspari and Cohn 1999), which mimics a Gaussian function with compact support. This means that the observations are spatially extended across the satellite tracks by a distance $2D$. The nudging coefficient K decreases exponentially as the distance from the track increases. Figure 1 illustrates a snapshot of available observations, their spatial influence, and the associated nudging coefficients.

Each nudging term, specific to one kind of sensor and one assimilation time window, is applied along a time window that is longer than the assimilation time window and centered on it. The length of this window is 2τ (τ has to be prescribed). The nudging coefficient K decreases exponentially as the distance

(in time) from the middle of the assimilation time window increases.

Mathematically, for each nudging operation, the nudging coefficient at time t and at the model grid point x can be written as

$$K(x, t) = K_0 e^{-[(t-t_a)/\tau]^2} e^{-[d(x)/D]^2}, \quad (8)$$

where K_0 is the nominal value of the nudging coefficient and t_a is the middle of the assimilation time window. $d(x)$ is the distance between the considered grid point and the observations. If this distance is below the grid resolution, it is set to 0. In all the following experiments, D is set to 10 km. Parameters K_0 and τ change according to the type of observations and the variable nudged, as detailed in section 3b.

The BFN-QG time window is set to 7 days to reconstruct the dynamics over the three days in the middle. The window is then shifted by 3 days, allowing to estimate the dynamics over the next three days, and so on. The time window is prescribed from considerations on the observation sampling, the decorrelation time of the dynamical model, and computational complexity. On the one hand, this window should be long enough to include a sufficient number of observations and correctly constrain the dynamics, and make sure that the state estimations in the middle of the window are influenced by both past and future observations. On the other hand, the window must be reasonably short to limit computational complexity, and because a too-long window would make some observations useless at the window extremes. We estimate that 7 days are a good trade-off.

3. Experimental design

a. Data

In this study, we test the ability of the BFN-QG to dynamically interpolate altimetric observations by setting up twin experiments based on virtual observation data drawn from an ocean circulation model. First, we use a free model run that we consider as our ground truth [called Nature Run (NR)]. Second, the NR is used to generate synthetic altimetric observations from current (nadir) and future (SWOT) observing systems. Then the synthetic observations are assimilated into the QG model by the BFN technique to produce gridded SSH maps that can be compared with the NR.

The NR has been drawn from the NATL60 configuration (Molines 2018) of the Nucleus for European Modelling of the Ocean (NEMO) model. With its $1/60^\circ$ horizontal resolution and 300 vertical levels over the North Atlantic basin, it is one of the most advanced basin-scale high-resolution simulation available today. For a detailed study dealing with physical characteristics of NATL60, we refer the reader to the paper of Ajayi et al. (2020). In short, these authors have shown that NATL60 exhibits a strong space–time variability in the size of small eddies (<100 km). The eddies are 2 times bigger in summer than in winter and their sizes vary geographically consistently with the latitudinal variation of the first Rossby radius of deformation. NATL60 has been used in several studies such as Metref et al. (2019, 2020), Fresnay et al. (2018), Amores

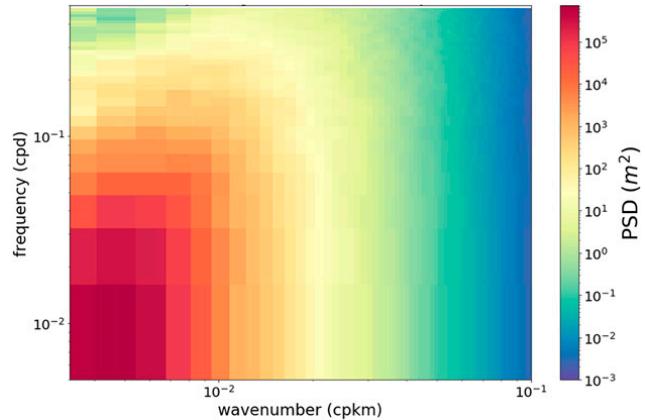


FIG. 2. SSH frequency–wavenumber spectra (in m^2) of the studied region from 1 May to 1 Jul 2013.

et al. (2018) and Ajayi et al. (2019). NATL60 resolves finescale dynamical processes down to 15 km at the surface (Ajayi et al. 2020), allowing us to test the mapping capabilities in all scale ranges offered by SWOT.

The SSH field of this NR is subsampled by realistic synthetic satellite constellations, simulating both nadir (conventional) and SWOT altimetry. Existing simulator tools (Gaultier et al. 2016) are used to generate the datasets.

As a first baseline to represent current observing capabilities, we consider a constellation of four conventional nadir altimeters following the theoretical ground tracks of two interleaved Jason-like and Sentinel-3-like orbits. The data are extracted with the SWOT simulator tool (Gaultier et al. 2016) in its nadir mode, at an along-track resolution set to 6 km for each satellite. The data are considered perfect; i.e., no source of measurement error is simulated.

As a second main dataset of this study, we consider SWOT-like observations also generated with the SWOT simulator in its swath mode. The spatial resolutions are set to 2 km, both in the along-track and across-track directions, consistently with the anticipated resolution of the future SWOT products. The observations provided by the Nadir module (which will be part of the payload) are also simulated, at a resolution of 6 km. Here again, we do not consider any kind of measurement error. Yet it is clear that the measurement errors will considerably affect the quality of the signal. This is discussed in section 3c.

To provide a baseline for evaluating our new mapping technique, the DUACS method has been applied to the synthetic altimetry observations described previously. The parameters used for the computation are those presented in Taburet et al. (2019). The generated maps are regular in space ($0.25^\circ \times 0.25^\circ$) and time (daily outputs).

b. Configurations

We focus on a region of the North Atlantic basin, containing a part of the Gulf Stream, dominated by energetic mesoscale dynamics. Figure 2 provides a description of the energy distribution both in space and time by showing the frequency–wavenumber power spectral density. This figure reveals that the energy is continuously spread out over all frequencies and

wavenumber, with the highest intensity for large space (>100 km) and time (>10 days) scales. As the region is a $10^\circ \times 10^\circ$ box, the Rossby radius of deformation is assumed constant in the domain, which facilitates the implementation of the QG model. The prescribed value for the Rossby radius of deformation is based on Chelton et al. (1998): 30 km.

To compare the performance of BFN-QG with the current mapping technique, the DUACS products, that were computed with the same artificial observations on the entire basin, are then extracted in the studied region over the same time period. This time period extends over three months, from 1 April to 1 July 2013. The first month is considered as a spinup period and is not considered in the diagnostics. Note that other experiments have been carried out in other time periods. The results, presented in the online supplemental material, show a strong robustness of the BFN-QG according to the dynamical regime.

Boundary conditions for the QG model are prescribed from the DUACS products. A relaxation zone, 1° wide, induces a smooth integration of the boundary conditions into the inner region. The relaxation is performed with a Gaspari–Cohn function (Gaspari and Cohn 1999) taking the DUACS product value at the outer boundary, and the QG model value at the inner boundary of the relaxation zone.

The nudging parameters (K_0 and τ) are fixed after a set of sensitivity experiments (not shown here). The nominal nudging coefficient K_0 defines *how strong* the nudging is and the nudging temporal window τ defines *how long* the nudging is performed toward each observation. The retained values, listed in Table 1, are specific to each nudging operation (nudging on SSH or on ξ) and each kind of observations (nadir or SWOT). Note that in Table 1 we fix the quantity $K_0 dt$ (dt being the model time step) which has to be below 1 to ensure the numerical stability of Eqs. (5) and (6). As mentioned in section 2c, we nudge only the vortex stretching component of the PV toward nadir data.

Two aspects are worth mentioning to justify the choice of the retained values. First, as the relative vorticity reveals smaller structures than SSH, τ and K_0 are set smaller for the nudging toward SWOT (ξ) than toward SWOT (SSH). Second, τ is set higher for SWOT (SSH) than for Nadirs in order to compensate the poor temporal sampling of SWOT in this region.

Some experiments are also conducted nudging only relative vorticity toward SWOT data, as explained in section 3c.

c. Observational scenarios

The mapping techniques (DUACS and BFN-QG) are run in the studied region, over three months, and testing three different observation scenarios: (i) four nadir altimeters (Nadirs), (ii) SWOT alone (SWOT) and (iii) nadir altimeters and SWOT concomitantly (Nadirs + SWOT). It is recalled that DUACS and BFN-QG algorithms are run with the same synthetic observations, presented in section 3a, to make the reconstructed fields comparable with each other.

To anticipate the processing of the real SWOT data, possibly affected by strong spatially correlated errors, two other BFN-QG experiments are introduced where the SWOT data are assimilated by the relative vorticity component of PV.

TABLE 1. Nudging parameters used in the experiments according to the kind of altimetric sensor (Nadir or SWOT) and the variable nudged (SSH or ξ).

Satellites	$K_0 dt$	τ (days)
Nadirs (SSH)	0.9	1
SWOT (SSH)	0.9	2
SWOT (ξ)	0.05	1

The SWOT correlated errors, to a large part specific to the satellite and instrument design (Peral and Esteban-Fernandez 2018), are particularly challenging for the mapping of altimetry because they can present significant amplitudes but cannot be easily filtered out using conventional filters. Hopefully, these strong spatially correlated errors are expected to have a much lower signature on ξ than on SSH (Gómez-Navarro et al. 2018). Ruling out the nudging of the vortex stretching component of PV, and keeping only the relative vorticity component, is thus an option to tackle the correlated-error issue. Practically, this means that the SWOT observations is only used to nudge the second term of the right-hand side of Eq. (7). The two additional experiments nudging only the relative vorticity with SWOT are one experiment nudging SWOT only, SWOT (ξ), and one experiment nudging SWOT and nadir altimeters, Nadirs + SWOT(ξ).

In total, five BFN-QG experiments are run as described previously in each domain: Nadirs, SWOT (q), SWOT (ξ), Nadirs + SWOT(q) and Nadirs + SWOT(ξ).

d. Diagnostics for evaluation

The reconstructed maps are interpolated to the $(1/60^\circ \times 1/60^\circ)$ grid of the NR at a daily frequency in order to compare them on the basis of the three diagnostics introduced below. Examples of interpolated fields are shown in Fig. 3.

Three evaluation diagnostics are considered, providing integrated and scale-dependent metrics on the algorithm performance. For each of them, a relative score between 0 and 1 is defined to allow an easy comparison.

- The root-mean-square error

The root-mean-square error (RMSE), first computed as a function of time, is defined by

$$\text{RMSE}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\text{SSH}(t, i) - \text{SSH}^{\text{true}}(t, i)]^2}, \quad (9)$$

where $\text{SSH}(t, i)$ and $\text{SSH}^{\text{true}}(t, i)$ are the values of the reconstructed field and the true field at the grid point i and time t ; N is the number of grid points included in the study domain. The RMSE diagnostic is known to be sensitive to phase errors (due to structures misplacement) regardless of the spatial scales of the structures.

For this diagnostic, the relative score RMSE_S is defined by

$$\text{RMSE}_S(t) = 1 - \frac{\text{RMSE}(t)}{\text{RMS}(\text{SSH}^{\text{true}})}, \quad (10)$$

where RMS is the root-mean-square function. For a given time, a score of 1 indicates a perfect reconstruction in terms

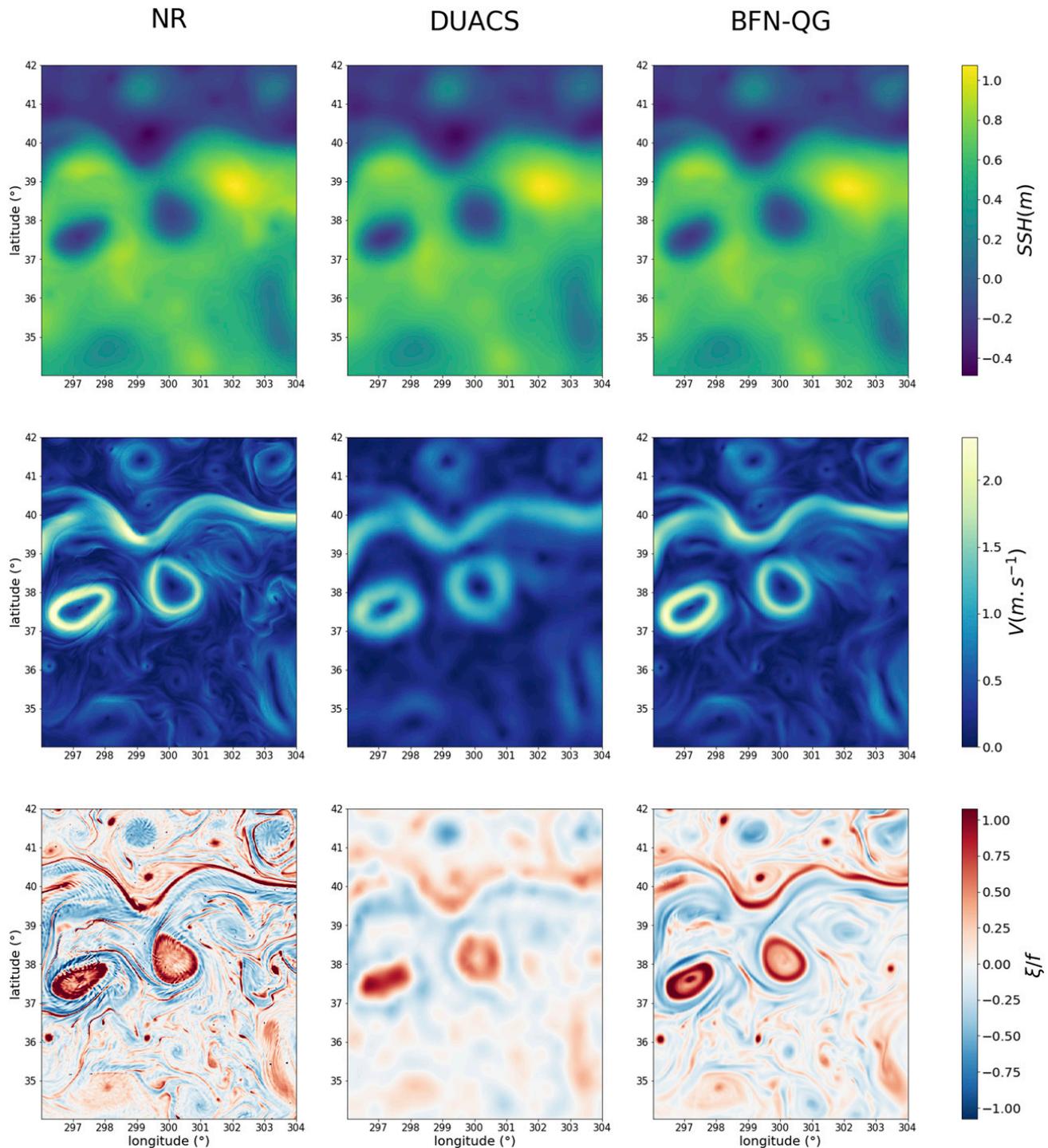


FIG. 3. Snapshots of (top) SSH, (middle) absolute geostrophic velocity, and (bottom) normalized geostrophic relative vorticity for the (left) NR, (center) DUACS, and (right) BFN-QG on 26 May 2013 in the studied region. DUACS and BFN-QG are processing both nadir and SWOT data. Velocity and relative vorticity maps are computed on the native grids, i.e., before the interpolation to the $(1/60^\circ \times 1/60^\circ)$ grid of the NR.

of RMSE, while a score of 0 indicates that the RMSE is as large as the RMS of the NR.

A time-mean score is also computed, as a single scalar for each experiment.

- The wavenumber power spectral density

This second diagnostic, the wavenumber power spectral density (WPSD) provides a spatial-scale-dependent metric. This is particularly useful to identify the smallest scales resolved by the maps. To compute the WPSD, we use the technique and the tool described in Ajayi et al. (2019). First,

the SSH fields are detrended and tapered using a Tukey window (with the alpha parameter equal to 0.5) along both spatial axes. Then a 2D fast Fourier transform (FFT) is applied to each SSH field. The WPSD is obtained by averaging the 2D FFTs in the azimuthal direction first, and then over time. The score WPSD_S is presented as a function of wavenumber, and defined by

$$\text{WPSD}_S = 1 - \frac{\text{WPSD}(\text{SSH} - \text{SSH}^{\text{true}})}{\text{WPSD}(\text{SSH}^{\text{true}})}. \quad (11)$$

For a given wavenumber, a score of 1 indicates a perfect reconstruction (the amplitude and phase of the corresponding harmonic is right) and a score of 0 indicates no phase correlation. The definition of this score slightly differs from Ballarotta et al. (2019) in that (i) here, the PSD calculation is on the azimuthal direction, and (ii) here, the best score is 1 instead of 0.

We also define the effective resolution (ER) of a reconstruction by the spatial scale at which WPSD_S is equal to 0.5 (Ballarotta et al. 2019). This is also a single scalar, expressed in kilometers, characterizing the spatial resolution of the maps.

- The frequency–wavenumber power spectral density
- The third diagnostic, the frequency–wavenumber power spectral density (FWPSD), provides a description of the resolved scales both in space and time. Figure 2 depicts the FWPSD of the NR in the studied region over the evaluation time period.

As for the WPSD, the SSH data are first detrended and tapered (here with a Hanning window) in space and time. The FWPSD is then computed by performing the 3D FFT along space and time dimensions. To compact the space dependence to one dimension, the spectra are azimuthally averaged as for WPSD.

Similarly to the WPSD, a score is defined, here in the frequency–wavenumber domain. The formula is similar to that of Eq. (11). This score will be represented on a 2D plot highlighting the reconstruction skills as a function of spatial and temporal scales.

4. Results and discussion

The mapping performance of DUACS and BFN-QG techniques are compared in Figs. 3–6 for the five experiments carried out in the studied region. Figure 3 illustrates snapshots of NR and the associated maps reconstructed by DUACS and BFN-QG. Figures 4–6 are presented in a common format: three horizontal panels corresponding to the three diagnostics (see section 3d). For each diagnostic (RMSE, WPSD, and FWPSD), the left panel presents the absolute quantity, and the right panel presents the associated scores. The time-mean RMSEs and the effective resolutions are also reported. NR is plotted in continuous thick black lines, the DUACS products in thin continuous black lines, and the BFN-QG products in thin dash colored lines. Figure 4 refers to the nadir-only scenario, Fig. 5 to the SWOT-only scenario, and Fig. 6 to the joint nadir-SWOT scenario. As stated earlier, the two scenarios involving SWOT include two experiments that differ by the way SWOT is assimilated.

In all five experiments, the BFN-QG performs better than DUACS, with one exception for the RMSE when only SWOT is assimilated with the relative vorticity formulation (Fig. 5, top panels).

The BFN-QG outperforms DUACS in the mapping of SSH from nadir altimetry only, and this outperformance is further increased when SWOT is introduced. For instance, the ER of the maps computed with nadir data (136.7 km for DUACS and 101.4 km for the BFN-QG) is improved by 26% with the BFN-QG in comparison to DUACS (Fig. 4) and this improvement reaches 33% when adding SWOT data (Fig. 6). This confirms the idea of Ubelmann et al. (2015) that adding information on ocean dynamics should improve the mapping of SSH when wide-swath altimetry is introduced.

In the scenario where only SWOT is assimilated, restricting the nudging to ξ significantly degrades the reconstruction performance. Figure 5 shows a significant increase of the RMSE when nudging only ξ . The middle panel of Fig. 5 indicates that this degradation mostly occurs at large spatial scales. In fact, the constraint applied to SSH only comes from the SWOT nadir altimeter through the nudging on the vortex stretching part of the PV and is not sufficient to constrain efficiently the large scales. However, both approaches of BFN-QG improve the ER in comparison with DUACS, what shows the relevance of this method for the reconstruction of scales below 150 km with SWOT.

In the nadir + SWOT scenarios, the BFN-QG partially damps the time variations of the reconstruction errors in comparison with DUACS, although these variations remain significant. The time variations of the reconstruction errors are clearly visible on the RMSE plots. The increasing phases coincide with time periods without SWOT observations. During these periods, which last approximately 5 days, estimation errors grow due to imperfect dynamics (both QG for BFN-QG and linear interpolation for DUACS). In the SWOT-only scenarios, the error-variation amplitudes in DUACS and BFN-QG results are comparable. Figure 6 shows that the nadir data help to reduce this amplitude with the BFN-QG, more than with DUACS.

The BFN-QG reconstructs structures at small scales with finer details than DUACS, as illustrated in Fig. 3. In particular, the discrepancies between DUACS and BFN-QG appear more significantly on ξ (depicting finer-scale structures) than on SSH. This difference in resolution is confirmed by the frequency–wavenumber spectral diagnostics. According to the FWPSDs, the BFN-QG can reconstruct smaller space and time scales than DUACS in general; in particular, when nadir and SWOT data are accounted for simultaneously, BFN-QG reaches scales of 80–100 km and 10 days. In all scenarios, the energy distribution of the DUACS reconstruction (upper-left panels of frequency–wavenumber PSD sections) is in agreement with the commonly known scales resolved by the maps (Ballarotta et al. 2019), around 120 km and 12 days. Above these scales (typically above 150 km and 15 days), the scores (right panels) indicate that all the reconstructions are reliable (blue color) with more signal than errors, except perhaps for the SWOT-only scenarios. Below these scales, three aspects can be highlighted: (i) BFN-QG produces more energy than

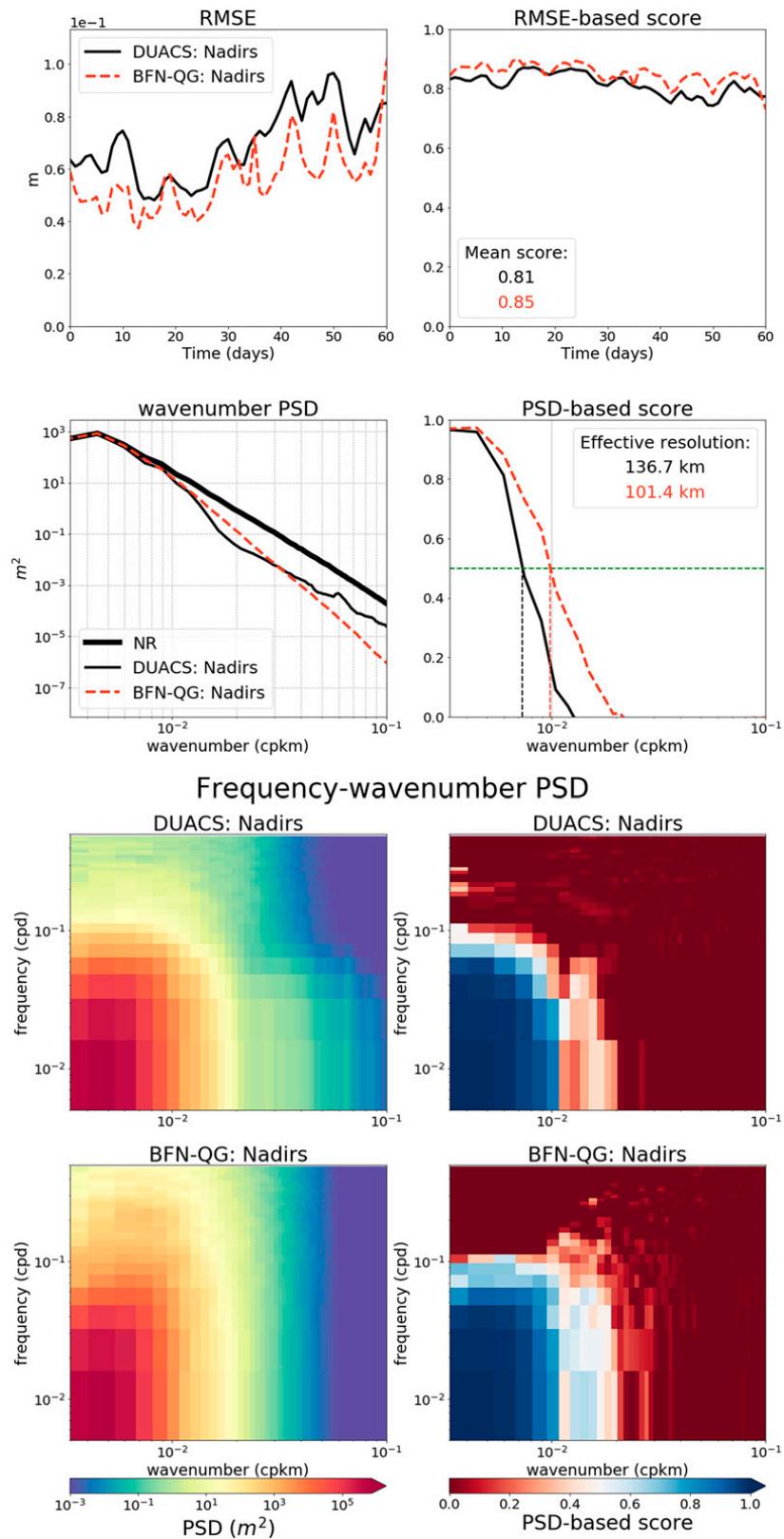


FIG. 4. (top) RMSE, (middle) wavenumber PSD, and (bottom) frequency-wavenumber PSD on SSH, for DUACS and BFN-QG processing a constellation of four nadir altimeters in the studied region during the 2-month period.

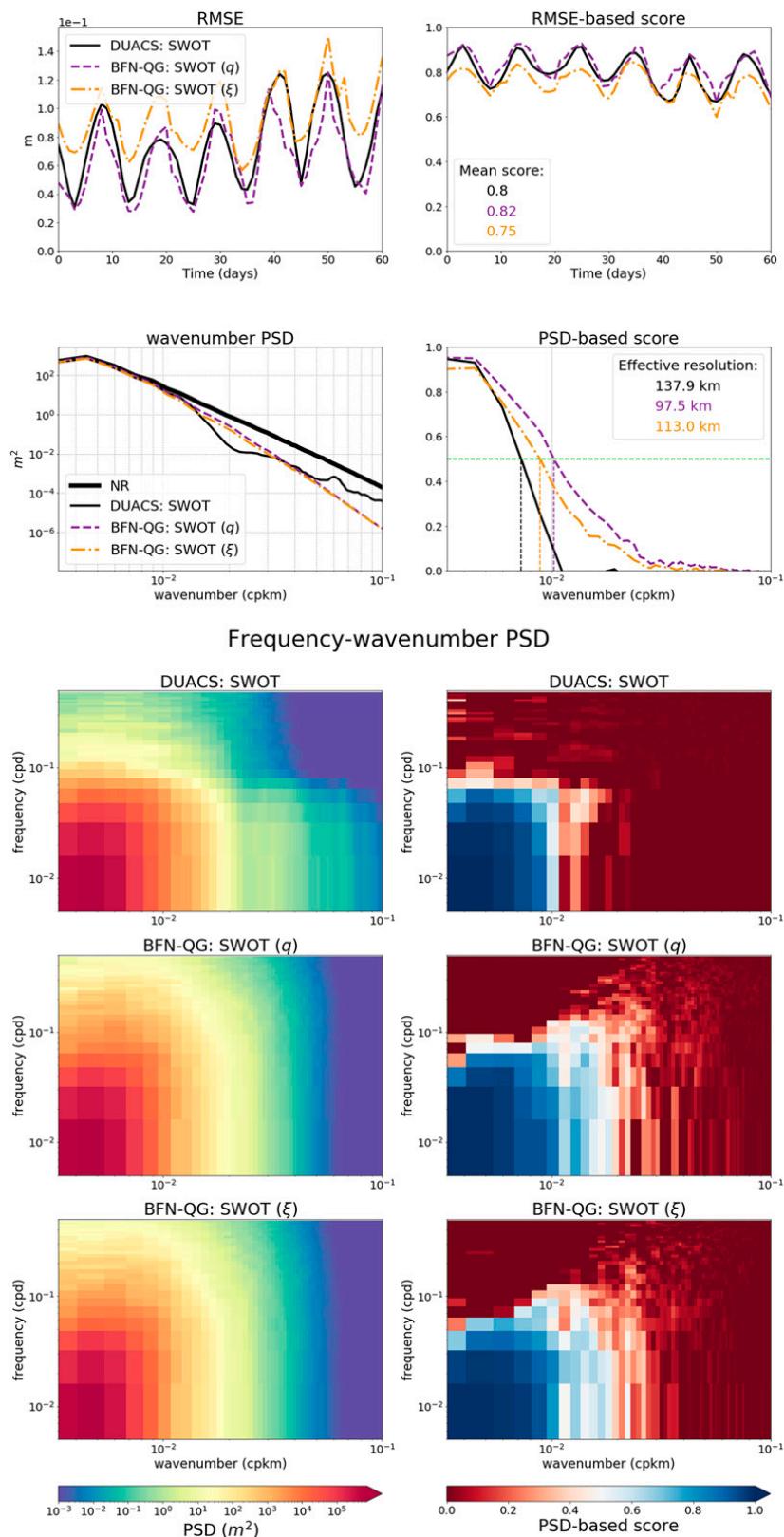


FIG. 5. As in Fig. 4, with SWOT only instead of the nadir altimeters. The BFN-QG is performed by nudging SWOT data on PV [SWOT(q), purple dashed line] or on relative vorticity [SWOT(ξ), orange dashed line].

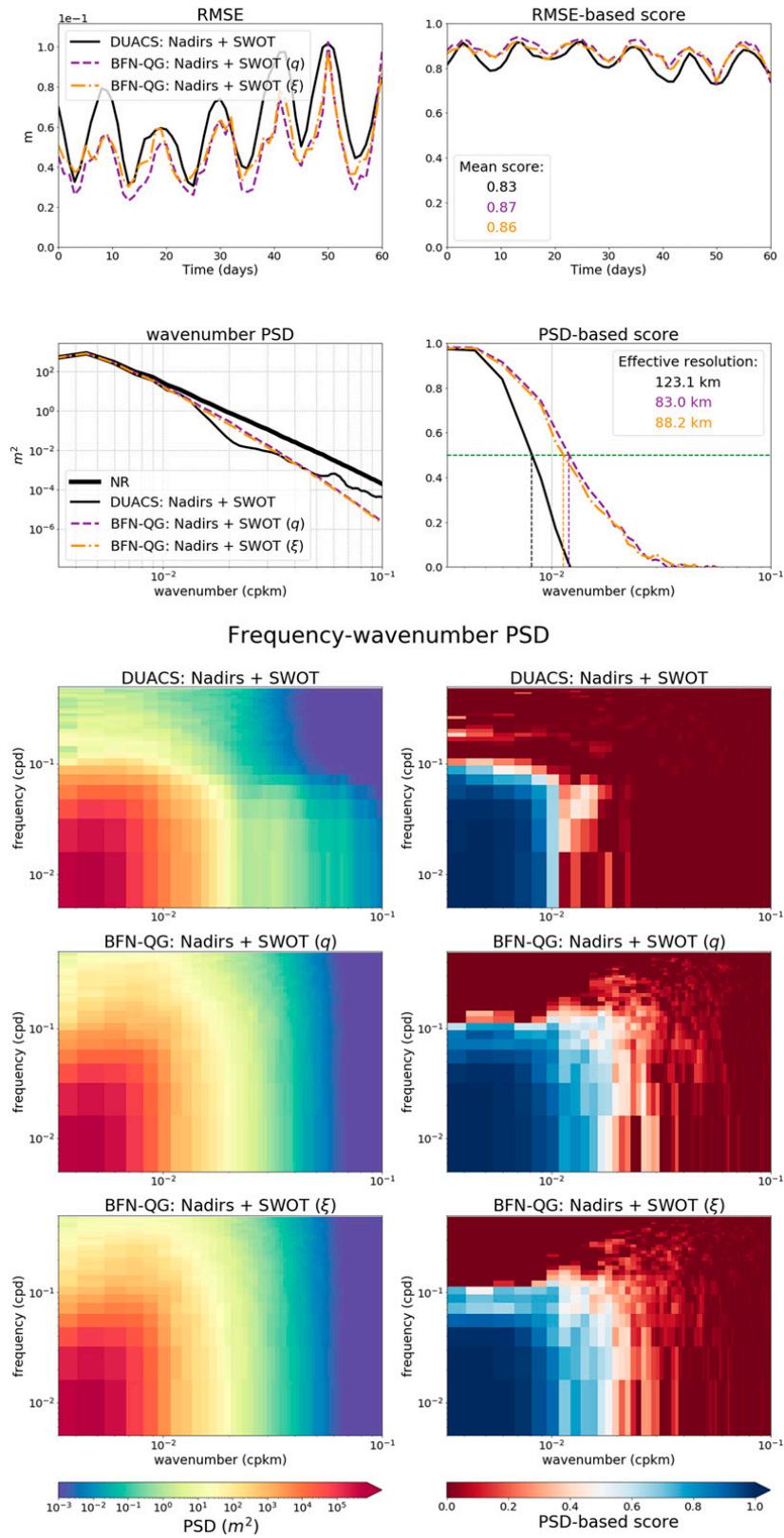


FIG. 6. As in Fig. 5, with SWOT and nadir altimeters altogether.

DUACS at short times scales (below 10 days), (ii) DUACS and BFN-QG create comparable PSDs at scales above 10 days, and (iii) the scores (right panels) indicate that the reconstructions of scales between 80 and 100 km are more reliable in BFN-QG than in DUACS. The latter statement remains true for time scales close to 10 days for the Nadir + SWOT scenarios. This is corroborated by Fig. 4 that shows that the discrepancies between DUACS and BFN-QG are much more visible on ξ (depicting finer-scale structures) than on SSH. Note that the spurious energy displayed in the FWPSDs of DUACS at scales above 10 days and below 30 km is due to the spatial interpolation of DUACS maps on the $(1/60^\circ \times 1/60^\circ)$ NR grid.

The conclusions on the performances of the mapping methods obtained in this study seem to be robust to geographical region changes. The experiments in another region, namely, the OSMOSIS region, presented in the supplementary material, are very different in terms of mapping challenges to the ones in the region presented here. Despite the difference in the nature of the mapping problem, the improvement brought by the dynamical constraint, i.e., the BFN-QG, in the mapping reconstruction is confirmed in the OSMOSIS region. Although the conclusions might not stand in very specific regions (e.g., tropical or coastal), this result tends to show the robustness of the conclusions to noncoastal midlatitude regions.

5. Conclusions

This study aimed at testing the ability of a simple data assimilation technique [viz., the back-and-forth nudging (BFN)] to map sea surface height (SSH) from realistic altimetric observations in the context of the future SWOT mission. The proposed mapping technique uses a 1.5-layer QG model forced by observations of SSH. The model is gradually nudged toward the observations while running forward and backward within a temporal window in an iterative process so as to overcome the problem of time distribution of the observations. The performance of this mapping technique, dubbed the BFN-QG, has been evaluated and compared with the standard SSH mapping products DUACS, for different satellite constellations that include conventional nadir and SWOT altimetric data.

The first conclusion of this work is that the BFN-QG is well suited to interpolate in space and time SSH provided by conventional nadir altimetric data. It manages to both reduce the root-mean-square errors (RMSEs) and improve the effective resolution (ER) of the maps in comparison with the DUACS technique. Future works should test this technique with real (or realistic) altimetric measurements to test the ability of the BFN-QG to process noisy data.

The second conclusion is that the good performance of the BFN-QG is increased when SWOT is added to the constellation of nadirs, improving the space–time resolutions of the maps by a factor comprised between 25% and 30% over the DUACS mapping resolutions. It seems that the BFN-QG is even more effective to interpolate the small-scale processes captured by SWOT than the DUACS method. The BFN-QG damps the time variations of reconstruction errors due to irregular satellite sampling better than DUACS. This suggests that using a more

complex dynamical model (e.g., a two-layer QG model) could make this process even more efficient.

Finally, if strong spatially correlated errors were to corrupt the SWOT measurement, the BFN-QG allows an alternative formulation that only nudges the relative vorticity derived from the SWOT data which should be less affected by correlated errors. In that context, the results show that this formulation produces relatively good quality SSH reconstructions under the crucial condition that the SWOT data must be combined with nadir data. Future works should expand this study by testing the BFN-QG with noisy synthetic SWOT data.

Of course, many developments remain to be made before the efficient mapping of SSH from SWOT. Some have been suggested previously. The mapping methods must be tested with more realistic error-containing observations. More sophisticated dynamical models may further improve the mapping.

A specific limitation of the work exposed in this paper lies in the assumption of a fixed deformation radius in the model, associated with the small size of the ocean domains considered. For SSH reconstructions over wider domains, we would have to deal with space-and-time variations (Guinehut et al. 2012) of the deformation radius and its compatibility with the QG model assumptions.

One particularly challenging development is related to the presence of internal gravity waves (IGWs) in the ocean. To maintain the focus of this study to a proof of concept, the Nature Run (NR) did not simulate IGWs therefore the impact of IGWs on SSH reconstruction was not a concern. However, it is strongly suspected that IGWs will affect the signal measured by SWOT. Even though, in many regions, IGWs should not be the dominating component of the signal at the scales reconstructed by the BFN-QG system, their impact on SSH reconstruction should be considered in further studies. For instance, an interesting idea would be to extend the BFN approach to IGWs by replacing the QG model with a gravity wave-permitting model.

Another challenging development is how to extend dynamical mapping approaches such as BFN-QG to coastal and tropical regions. Once again, a possible development would be to replace the QG model with a model more appropriate to simulate the dynamics of these regions. One particular limitation of this task is that the employed reduced models have to be reversible to work with BFN.

Acknowledgments. The authors thank Jean Marc Molines for carrying out the NATL60 simulation and Aurélie Albert from Ocean Next for her contribution to the preparation and extraction of the data. This research was funded by ANR (Project ANR-17-CE01-0009-01) and CNES through the SWOT Science Team program.

Data availability statement. The data used in this study can be accessed at the following URL: https://ige-meom-opendap.univ-grenoble-alpes.fr/thredds/catalog/meomopendap/extract/LeGuillou/data_LeGuillou_2020/catalog.html. An SSH mapping data challenge, based on the experimental setup presented in this paper, is described here: https://github.com/ocean-data-challenges/2020a_SSH_mapping_NATL60 and identified on

Zenodo platform with DOI 10.5281/zenodo.4045400 (<https://doi.org/10.5281/zenodo.4045400>).

REFERENCES

- Ablain, M., J. F. Legeais, P. Prandi, M. Marcos, L. Fenoglio-Marc, H. B. Dieng, J. Benveniste, and A. Cazenave, 2017: Satellite altimetry-based sea level at global and regional scales. *Surv. Geophys.*, **38**, 7–31, <https://doi.org/10.1007/s10712-016-9389-8>.
- Ajayi, A., J. Le Sommer, E. Chassignet, J.-M. Molines, X. Xu, A. Albert, and W. Dewar, 2019: Diagnosing cross-scale kinetic energy exchanges from two submesoscale permitting ocean models. *Earth Space Science Open Archive*, <https://doi.org/10.1002/essoar.10501077.1>.
- , —, —, —, —, —, and E. Cosme, 2020: Spatial and temporal variability of the North Atlantic eddy field from two kilometric-resolution ocean models. *J. Geophys. Res. Oceans*, **125**, e2019JC015827, <https://doi.org/10.1029/2019JC015827>.
- Amores, A., G. Jordà, T. Arsuze, and J. L. Sommer, 2018: Up to what extent can we characterize ocean eddies using present-day gridded altimetric products? *J. Geophys. Res. Oceans*, **123**, 7220–7236, <https://doi.org/10.1029/2018JC014140>.
- Anthes, R., 1974: Data assimilation and initialization of hurricane prediction models. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 702–719, [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<0702:DAAIOH>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<0702:DAAIOH>2.0.CO;2).
- Auroux, D., and J. Blum, 2008: A nudging-based data assimilation method: The back and forth nudging (BFN) algorithm. *Nonlinear Processes Geophys.*, **15**, 305–319, <https://doi.org/10.5194/npg-15-305-2008>.
- Ballarotta, M., and Coauthors, 2019: On the resolutions of ocean altimetry maps. *Ocean Sci.*, **15**, 1091–1109, <https://doi.org/10.5194/os-15-1091-2019>.
- , and Coauthors, 2020: Dynamic mapping of along-track ocean altimetry: Performance from real observations. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **37**, 1593–1601, <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-20-0030.1>.
- Blayo, E., J. Verron, and J. M. Molines, 1994: Assimilation of TOPEX/Poseidon altimeter data into a circulation model of the North Atlantic. *J. Geophys. Res.*, **99**, 24 691–24 705, <https://doi.org/10.1029/94JC01644>.
- Buongiorno Nardelli, B., 2020: A multi-year timeseries of observation-based 3D horizontal and vertical quasi-geostrophic global ocean currents. *Earth Sys. Sci. Data*, **12**, 1711–1723, <https://doi.org/10.5194/essd-12-1711-2020>.
- Chelton, D. B., R. A. deSzoeke, M. G. Schlax, K. El Naggar, and N. Siwertz, 1998: Geographical variability of the first baroclinic Rossby radius of deformation. *J. Phys. Oceanogr.*, **28**, 433–460, [https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1998\)028<0433:GVOTFB>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1998)028<0433:GVOTFB>2.0.CO;2).
- , M. G. Schlax, and R. M. Samelson, 2011: Global observations of nonlinear mesoscale eddies. *Prog. Oceanogr.*, **91**, 167–216, <https://doi.org/10.1016/j.pocean.2011.01.002>.
- Fresnay, S., A. L. Ponte, S. Le Gentil, and J. Le Sommer, 2018: Reconstruction of the 3-D dynamics from surface variables in a high-resolution simulation of North Atlantic. *J. Geophys. Res. Oceans*, **123**, 1612–1630, <https://doi.org/10.1002/2017JC013400>.
- Fu, L.-L., D. B. Chelton, P.-Y. Le Traon, and R. Morrow, 2010: Eddy dynamics from satellite altimetry. *Oceanography*, **23** (4), 14–25, <https://doi.org/10.5670/oceanog.2010.02>.
- , E. Rodriguez, D. Alsdorf, and R. Morrow, 2012: The SWOT mission science document. NASA JPL Tech. Rep., 222 pp., https://swot.jpl.nasa.gov/files/swot/SWOT_MSD_1202012.pdf.
- Gaspari, G., and S. E. Cohn, 1999: Construction of correlation functions in two and three dimensions. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **125**, 723–757, <https://doi.org/10.1002/qj.49712555417>.
- Gaultier, L., C. Ubelmann, and L.-L. Fu, 2016: The challenge of using future SWOT data for oceanic field reconstruction. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **33**, 119–126, <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-15-0160.1>.
- Gómez-Navarro, L., R. Fablet, E. Mason, A. Pascual, B. Mourre, E. Cosme, and J. Le Sommer, 2018: SWOT spatial scales in the western Mediterranean Sea derived from pseudo-observations and an ad hoc filtering. *Remote Sens.*, **10**, 599, <https://doi.org/10.3390/rs10040599>.
- Guinehut, S., A.-L. Dhomps, G. Larnicol, and P.-Y. Le Traon, 2012: High resolution 3-D temperature and salinity fields derived from in situ and satellite observations. *Ocean Sci.*, **8**, 845–857, <https://doi.org/10.5194/os-8-845-2012>.
- Hoke, J. E., and R. A. Anthes, 1976: The initialization of numerical models by a dynamic-initialization technique. *Mon. Wea. Rev.*, **104**, 1551–1556, [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1976\)104<1551:TIONMB>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1976)104<1551:TIONMB>2.0.CO;2).
- Holland, W. R., and P. Malanotte-Rizzoli, 1989: Assimilation of altimeter data into an ocean circulation model: Space versus time resolution studies. *J. Phys. Oceanogr.*, **19**, 1507–1534, [https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1989\)019<1507:AOADIA>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1989)019<1507:AOADIA>2.0.CO;2).
- Lea, D. J., J.-P. Drecourt, K. Haines, and M. J. Martin, 2008: Ocean altimeter assimilation with observational- and model-bias correction. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **134**, 1761–1774, <https://doi.org/10.1002/qj.320>.
- Leeuwenburgh, O., 2005: Assimilation of along-track altimeter data in the tropical Pacific region of a global OGCM ensemble. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **131**, 2455–2472, <https://doi.org/10.1256/qj.04.146>.
- Le Traon, P. Y., F. Nadal, and N. Ducet, 1998: An improved mapping method of multisatellite altimeter data. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **15**, 522–534, [https://doi.org/10.1175/1520-0426\(1998\)015<0522:AIMMOM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0426(1998)015<0522:AIMMOM>2.0.CO;2).
- Martin, M. J., A. Hines, and M. J. Bell, 2007: Data assimilation in the foam operational short-range ocean forecasting system: A description of the scheme and its impact. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **133**, 981–995, <https://doi.org/10.1002/qj.74>.
- Metre, S., E. Cosme, J. Le Sommer, N. Poel, J.-M. Brankart, J. Verron, and L. Gómez Navarro, 2019: Reduction of spatially structured errors in wide-swath altimetric satellite data using data assimilation. *Remote Sens.*, **11**, 1336, <https://doi.org/10.3390/rs11111336>.
- , —, F. Le Guillou, J. Le Sommer, J.-M. Brankart, and J. Verron, 2020: Wide-swath altimetric satellite data assimilation with correlated-error reduction. *Front. Mar. Sci.*, **6**, 822, <https://doi.org/10.3389/fmars.2019.00822>.
- Molines, J.-M., 2018: meom-configurations/NATL60-CJM165: NATL60 code used for CJM165 experiment. Zenodo, <https://zenodo.org/record/1210116#.Xp2bwFMzYUE>.
- Morrow, R., and P. Le Traon, 2012: Recent advances in observing mesoscale ocean dynamics with satellite altimetry. *Adv. Space Res.*, **50**, 1062–1076, <https://doi.org/10.1016/j.asr.2011.09.033>.
- , and Coauthors, 2019: Global observations of fine-scale ocean surface topography with the Surface Water and Ocean Topography (SWOT) mission. *Front. Mar. Sci.*, **6**, 232, <https://doi.org/10.3389/fmars.2019.00232>.
- Mulet, S., M.-H. Rio, A. Mignot, S. Guinehut, and R. Morrow, 2012: A new estimate of the global 3D geostrophic ocean circulation

- based on satellite data and in-situ measurements. *Deep-Sea Res. II*, **77–80**, 70–81, <https://doi.org/10.1016/j.dsr2.2012.04.012>.
- Pascual, A., Y. Faugère, G. Larnicol, and P.-Y. L. Traon, 2006: Improved description of the ocean mesoscale variability by combining four satellite altimeters. *Geophys. Res. Lett.*, **33**, L02611, <https://doi.org/10.1029/2005GL024633>.
- Peral, E., and D. Esteban-Fernandez, 2018: SWOT mission performance and error budget. *IEEE Int. Geoscience and Remote Sensing Symp.*, Valencia, Spain, IEEE, 8625–8628, <https://doi.org/10.1109/IGARSS.2018.8517385>.
- Ruggiero, G. A., Y. Ourmieres, E. Cosme, J. Blum, D. Auroux, and J. Verron, 2015: Data assimilation experiments using diffusive back-and-forth nudging for the NEMO ocean model. *Nonlinear Processes Geophys.*, **22**, 233–248, <https://doi.org/10.5194/npg-22-233-2015>.
- Skamarock, W., 2004: Evaluating mesoscale NWP models using kinetic energy spectra. *Mon. Wea. Rev.*, **132**, 3019–3032, <https://doi.org/10.1175/MWR2830.1>.
- Storto, A., S. Dobricic, S. Masina, and P. Di Pietro, 2011: Assimilating along-track altimetric observations through local hydrostatic adjustment in a global ocean variational assimilation system. *Mon. Wea. Rev.*, **139**, 738–754, <https://doi.org/10.1175/2010MWR3350.1>.
- Taburet, G., and Coauthors, 2019: DUACS DT2018: 25 years of reprocessed sea level altimetry products. *Ocean Sci.*, **15**, 1207–1224, <https://doi.org/10.5194/os-15-1207-2019>.
- Ubelmann, C., P. Klein, and L.-L. Fu, 2015: Dynamic interpolation of sea surface height and potential applications for future high-resolution altimetry mapping. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **32**, 177–184, <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-14-00152.1>.
- , B. Cornuelle, and L.-L. Fu, 2016: Dynamic mapping of along-track ocean altimetry: Method and performance from observing system simulation experiments. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **33**, 1691–1699, <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-15-0163.1>.
- Vallis, G. K., 2006: *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics: Fundamentals and Large-Scale Circulation*. Cambridge University Press, 773 pp.
- Verron, J., 1990: Altimeter data assimilation into an ocean circulation model—Sensitivity to orbital parameters. *J. Geophys. Res.*, **95**, 11 443–11 459, <https://doi.org/10.1029/JC095iC07p11443>.
- , 1992: Nudging satellite altimeter data into quasi-geostrophic ocean models. *J. Geophys. Res.*, **97**, 7479–7491, <https://doi.org/10.1029/92JC00200>.
- von Schuckmann, K., et al., 2018: Copernicus Marine Service ocean state report. *J. Oper. Oceanogr.*, **11**, S1–S142, <https://doi.org/10.1080/1755876X.2018.1489208>.
- Wan, L., L. Bertino, and J. Zhu, 2010: Assimilating altimetry data into a HYCOM model of the Pacific: Ensemble optimal interpolation versus ensemble Kalman filter. *J. Atmos. Ocean. Technol.*, **27**, 753–765, <https://doi.org/10.1175/2009JTECHO626.1>.
- Wang, J., L.-L. Fu, H. S. Torres, S. Chen, B. Qiu, and D. Menemenlis, 2019: On the spatial scales to be resolved by the surface water and ocean topography Ka-band radar interferometer. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, **36**, 87–99, <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-18-0119.1>.

3.3 Supplemental Material

In the main document, we have shown the relevance of a data assimilation algorithm, the BFN-QG, to map SSH from nadir and SWOT data in a highly dynamical region (namely the GULFSTREAM region). The BFN-QG has been tested in the framework of OSSE with current (nadir) and future (SWOT-like) realistic altimetric observations. The SSH maps, provided by different observational scenario, have been systematically compared to conventional DUACS products. The comparison has been made during a time period extending over two months, from April 1, 2013, to July 1, 2013.

We propose in this document to assess the robustness of the BFN-QG algorithm to geographical region and seasonal changes. In section 3.3.1, we present the results of the mapping performances obtained in winter (February-March) and summer (August-September). Only the scenario where Nadir and SWOT data are assimilated all together is presented. In section 3.3.2, we focus on another region, namely the OSMOSIS region. All experiments performed for the GULFSTREAM region remain the same, with a few adjustments to some of the parameters of the algorithm.

3.3.1 Robustness to seasonal change

Recent model-based studies suggest that the ocean upper layer (sub)mesoscale dynamics has a strong seasonality (Ajayi et al. (2020); Uchida et al. (2017)). In particular, winter is marked by the apparition of small vortices (<50km) associated with mixed layer instabilities. In Ajayi et al. (2020), the authors have shown that the mean eddy scale in summer is twice as large as in winter in the NATL60 simulation.

In the main document, we chose to compare the BFN with DUACS over one intermediate season, in spring, in order to be as general as possible. However, it is scientifically interesting to test our mapping technique over other time periods, to check the consistency of the method over different dynamical regimes.

Two other experiments have been carried out in the GULFSTREAM region : one in winter (from January 1, 2013, to April 1, 2013), the other in summer (from July 1, 2013, to October 1, 2013). As in the main article, the first month of each period is considered as a spin-up period and is not considered in the diagnostics. We focus here only on the constellation of SWOT and Nadir satellites. All the parameters relative to the BFN-QG algorithm are identical to the ones used in the main document.

Figures 3.1 and 3.2 illustrate examples of snapshots of the nature run (NR ; i.e. the "true" state of the ocean) and the reconstructions from DUACS and BFN-QG for the two seasons.

We can clearly see on the vorticity snapshots (bottom left panels) the increase of the number of submesoscale vortices in winter compared to summer.

The performances of the reconstructions for the two seasons are reported on Figures 3.4 and 3.3. The diagnostics show that whatever the season (winter, spring, summer), the BFN-QG outperforms the DUACS method, whether in terms of RMSE or PSD. One particularly interesting feature is that the spatial resolution of the maps derived by the BFN-QG algorithm is the same in winter and summer, what shows a strong robustness of the method according to the dynamical regime.

3.3.2 Robustness to geographical region change

3.3.3 The OSMOSIS region

The OSMOSIS region is a ten by ten degrees box located on the Porcupine Abyssal plain, as represented in figure 3.5. The choice of this regions is made essentially for two reasons. First, the OSMOSIS region is less energetic than the GULFSTREAM region, with more discernible small scale processes. Figure 3.6 illustrates this dynamical difference by showing the frequency-wavenumber power spectral density, which provides a description of the resolved scales both in space and time. In this figure, we clearly see that the GULFSTREAM region exhibits physical processes 100 times more energetic at scales $< 10^{-2}$ cpkm ($> 100\text{km}$) and that this high energy is associated with physical processes presenting a higher temporal variability compared to the OSMOSIS region. Besides, the spatial gradient of energy around 100km is less pronounced in the OSMOSIS region, revealing finer structures at scales $< 100\text{km}$. Second, the OSMOSIS region differs from the GULFSTREAM region by the difference in temporal samplings of SWOT due to their different latitude locations, with a regular sampling in the OSMOSIS region (one SWOT observation every day) versus an irregular sampling in the GULFSTREAM region (time periods of several days without observations).

Configuration of the BFN-QG

In this section, we detail the tunable parameters of the BFN-QG algorithm that differ in the two regions : the Rossby radius of deformation L_R , the nominal nudging coefficient K_0 and the nudging temporal window τ .

Following Chelton et al. (1998), L_R is set equal to 20km in the OSMOSIS region (versus 30km in the GULFSTREAM region). This corroborates the fact that the OSMOSIS displays finer mesoscale structures than the GULFSTREAM region.

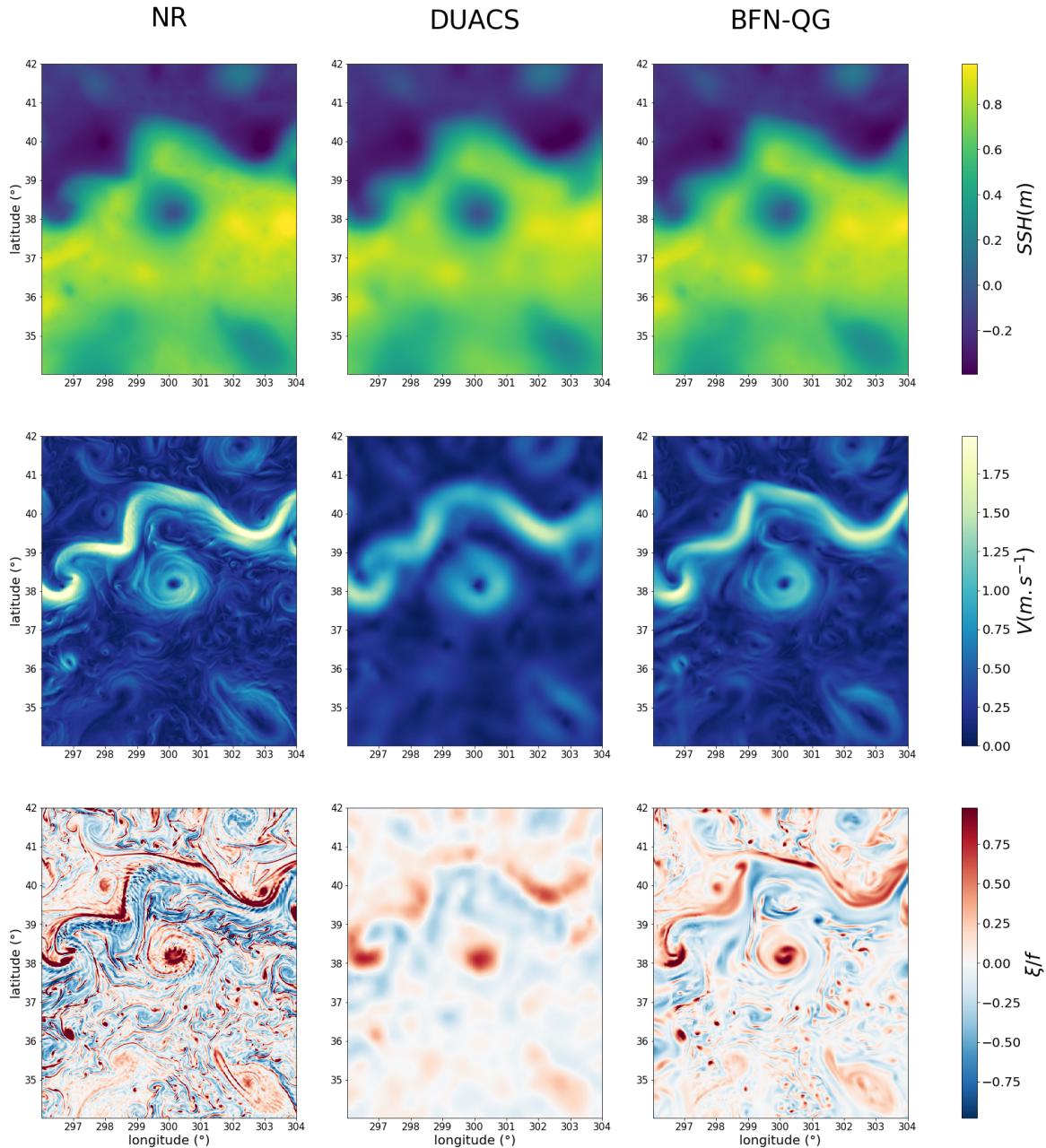


FIGURE 3.1 Snapshots of SSH (top), absolute geostrophic velocity (middle line) and normalized geostrophic relative vorticity (bottom) for the NR (left), DUACS (middle column) and BFN-QG (right) on February 25, 2013 in the GULFSTREAM region. DUACS and BFN-QG are processing both nadir and SWOT data. Velocity and relative vorticity maps are computed on the native grids, i.e. before the interpolation to the $(1/60^\circ \times 1/60^\circ)$ grid of the NR.

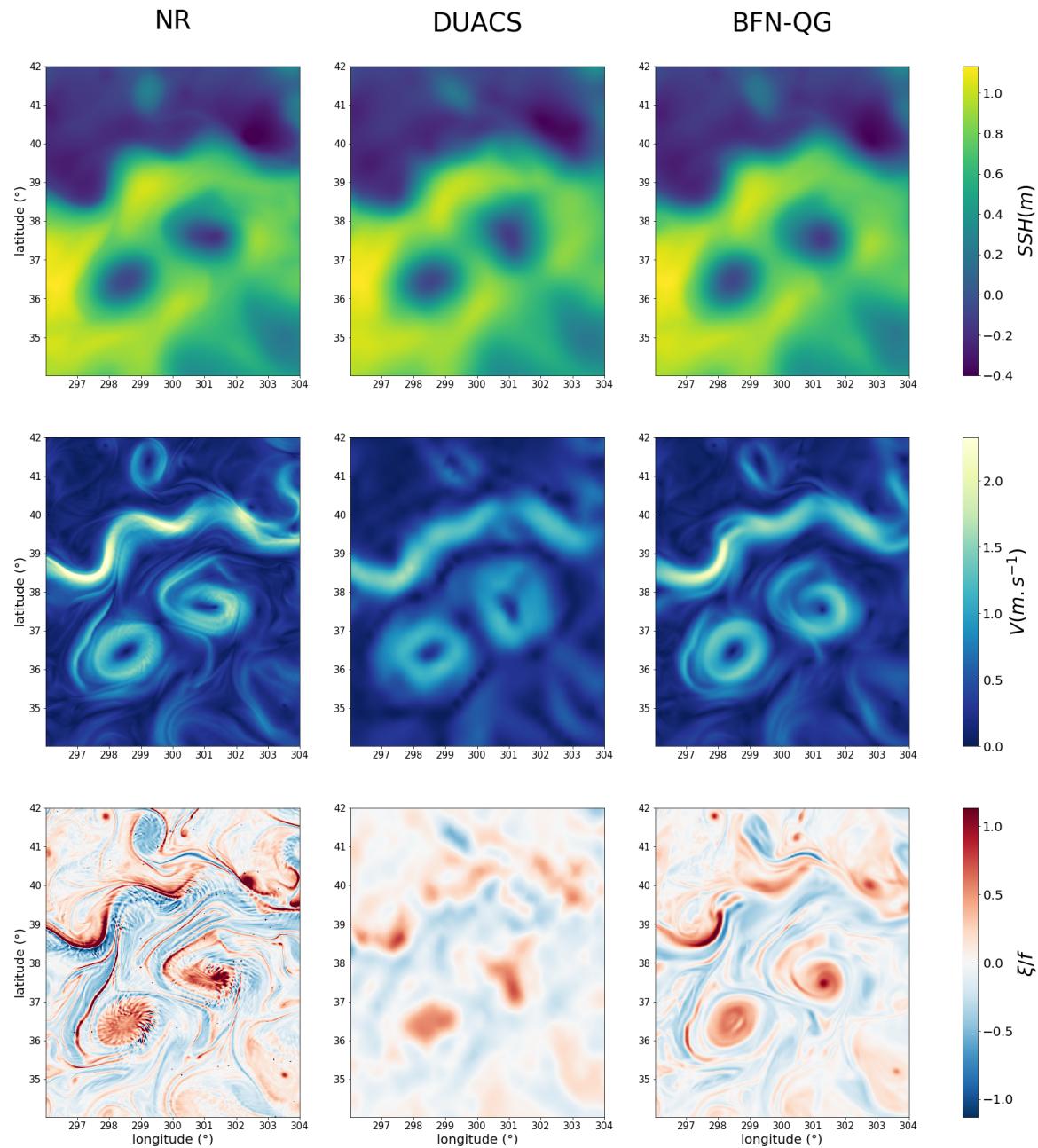


FIGURE 3.2 Same as Figure 3.1 but on August 19, 2013

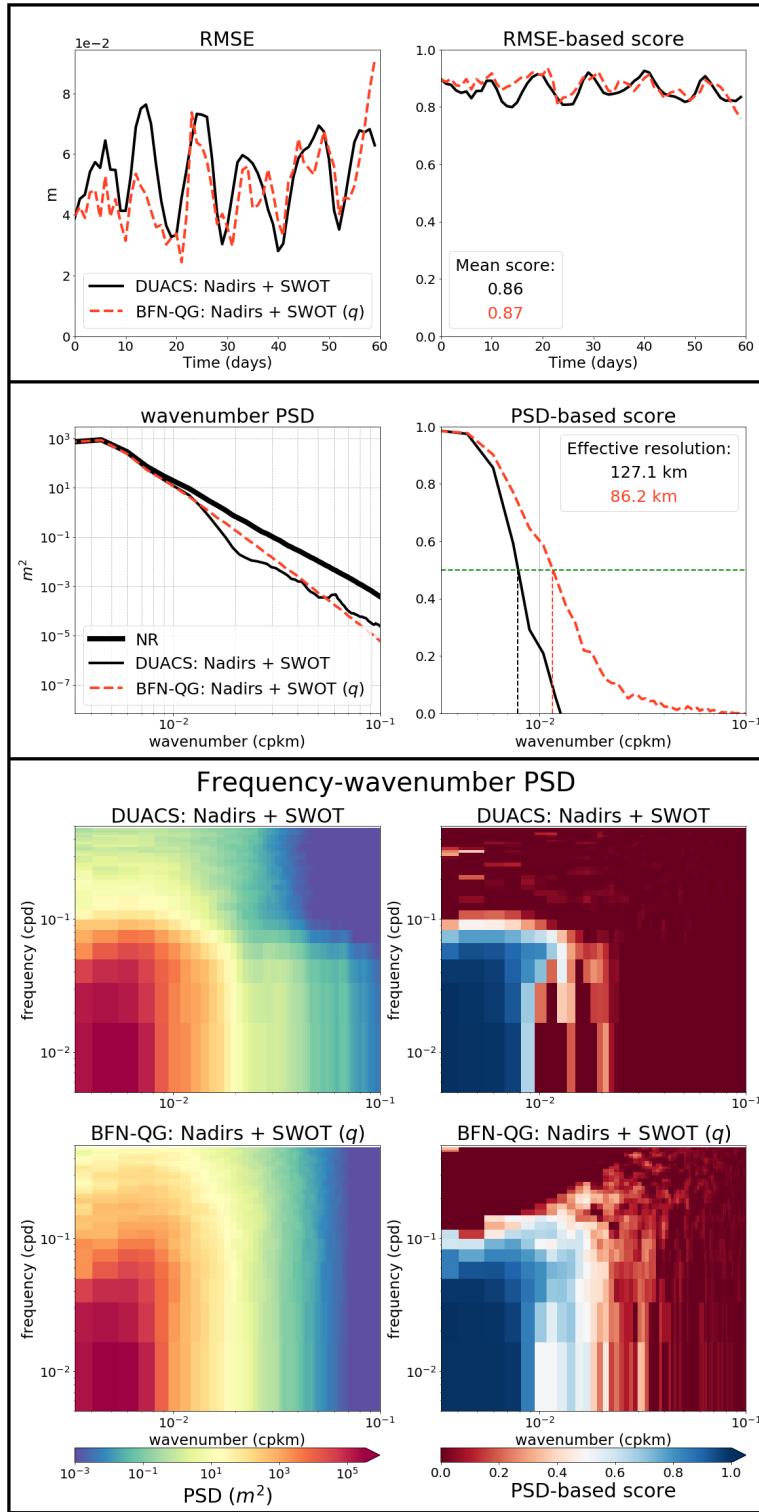


FIGURE 3.3 RMSE (top), wavenumber PSD (middle) and frequency-wavenumber PSD (bottom) on SSH, for DUACS and BFN-QG with SWOT and nadir altimeters altogether in winter (February and March 2013).

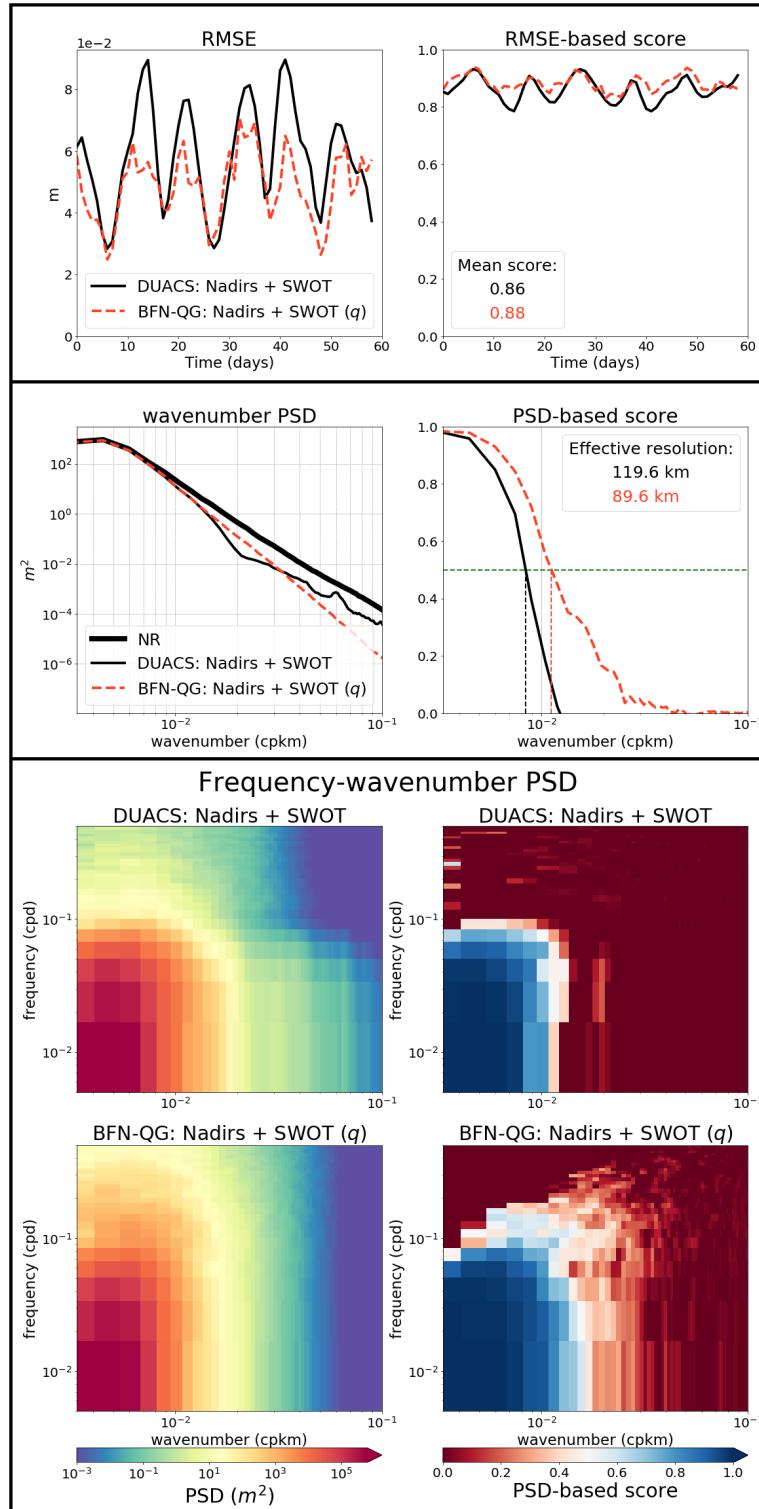


FIGURE 3.4 Same as Figure 3.3 but in summer (August and September 2013).

The nudging parameters (K_0 and τ) are listed in table 3.1. As a reminder, we show also the parameters set for the GULFSTREAM region. The OSMOSIS region being less energetic than the GULFSTREAM region, the correlation time scale of the flow is longer. That is why τ is higher in OSMOSIS than in GULFSTREAM for nadir data. Yet, for SWOT data, τ was set higher in GULFSTREAM to compensate its poor temporal sampling in this region.

Satellites	$K_0 dt$		τ (days)	
	GS	OSMO	GS	OSMO
Nadirs (SSH)	0.9	0.1	1	2
SWOT (SSH)	0.9	0.7	2	1
SWOT (ξ)	0.05	0.05	1	0.5

TABLE 3.1 Nudging parameters used in the experiments according to the kind of altimetric sensor (nadir or SWOT), the studied region (GS for GULFSTREAM, OSMO for OSMOSIS) and the variable nudged (SSH/ξ)

Results

Figures 3.7, 3.8, 3.9, and 3.10 are in the same format as in the main document, but for the OSMOSIS region. The results are qualitatively similar to the GULFSTREAM region, so that the analysis conducted in Section 4 in the main document holds. The main two differences are :

- The effective resolution is generally better in the OSMOSIS region than in the GULFSTREAM region. This is very likely due to a less intense dynamics in the former, and to more frequent revisits of the satellite in the OSMOSIS region, located at latitudes higher than the GULFSTREAM region ;
- The RMSE time series for the experiment including SWOT do not exhibit regular oscillations as in the GULFSTREAM region. In the latter, the oscillations are due to a five-day period without any SWOT pass. This is not the case in the OSMOSIS region, because of the region location again.

Although the experiments in the OSMOSIS region are very different in terms of mapping challenges to the ones in the GULFSTREAM region, the improvement brought by the dynamical constraint, i.e. the BFN-QG, in the mapping reconstruction is confirmed in the OSMOSIS region.

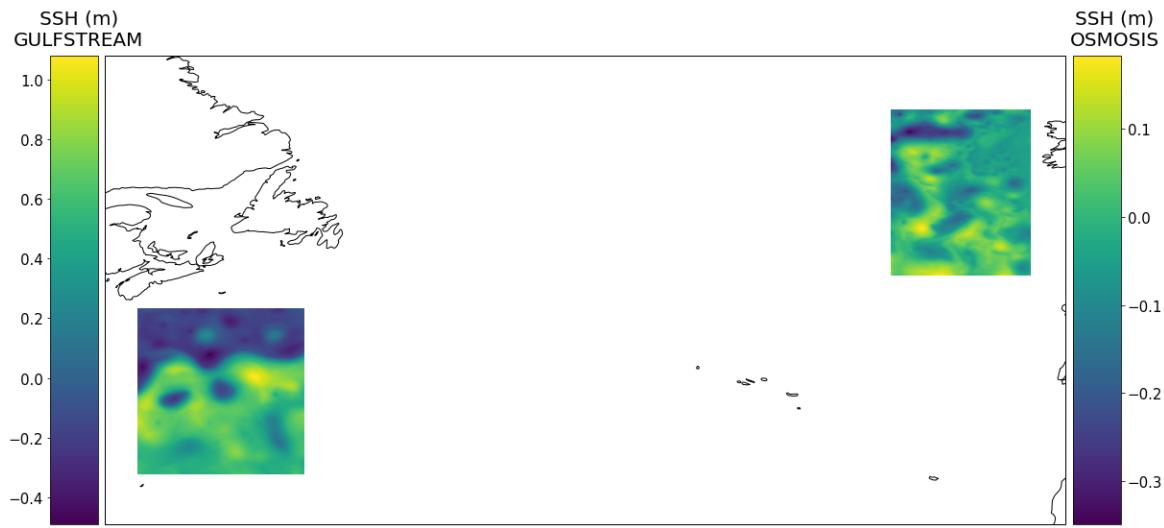


FIGURE 3.5 SSH snapshots (in m) of the two studied regions from the NR on May 26, 2013. On the left, the GULFSTREAM region, with SSH ranging from $-0.4m$ to $1m$. On the right, the OSMOSIS region, with SSH ranging from $-0.4m$ to $0.2m$.

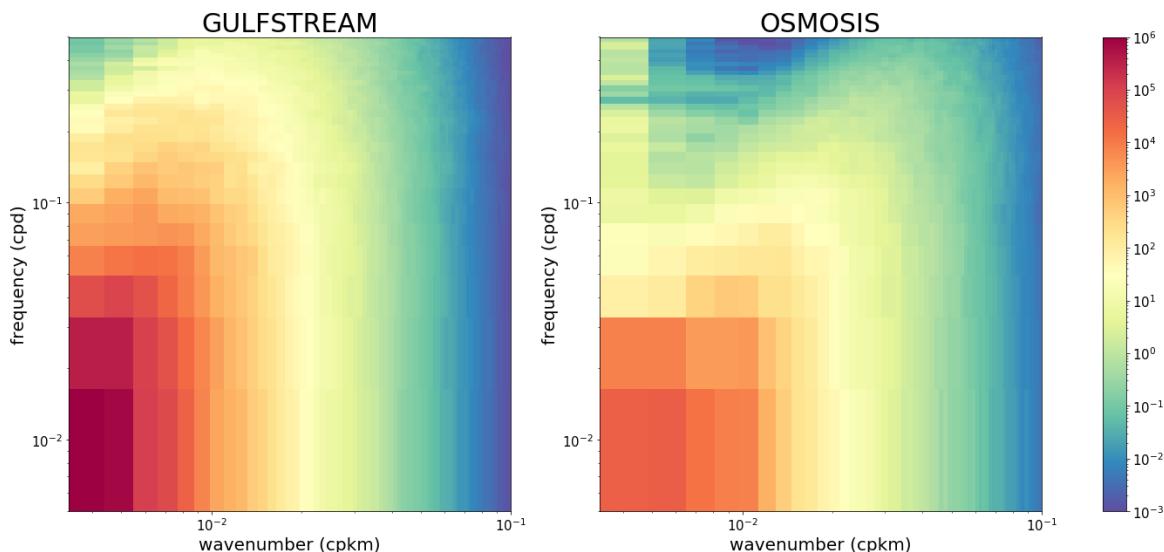


FIGURE 3.6 SSH Frequency-wavenumber spectra (in m^2) of the two studied regions from May 1, 2013 to July 1, 2013.

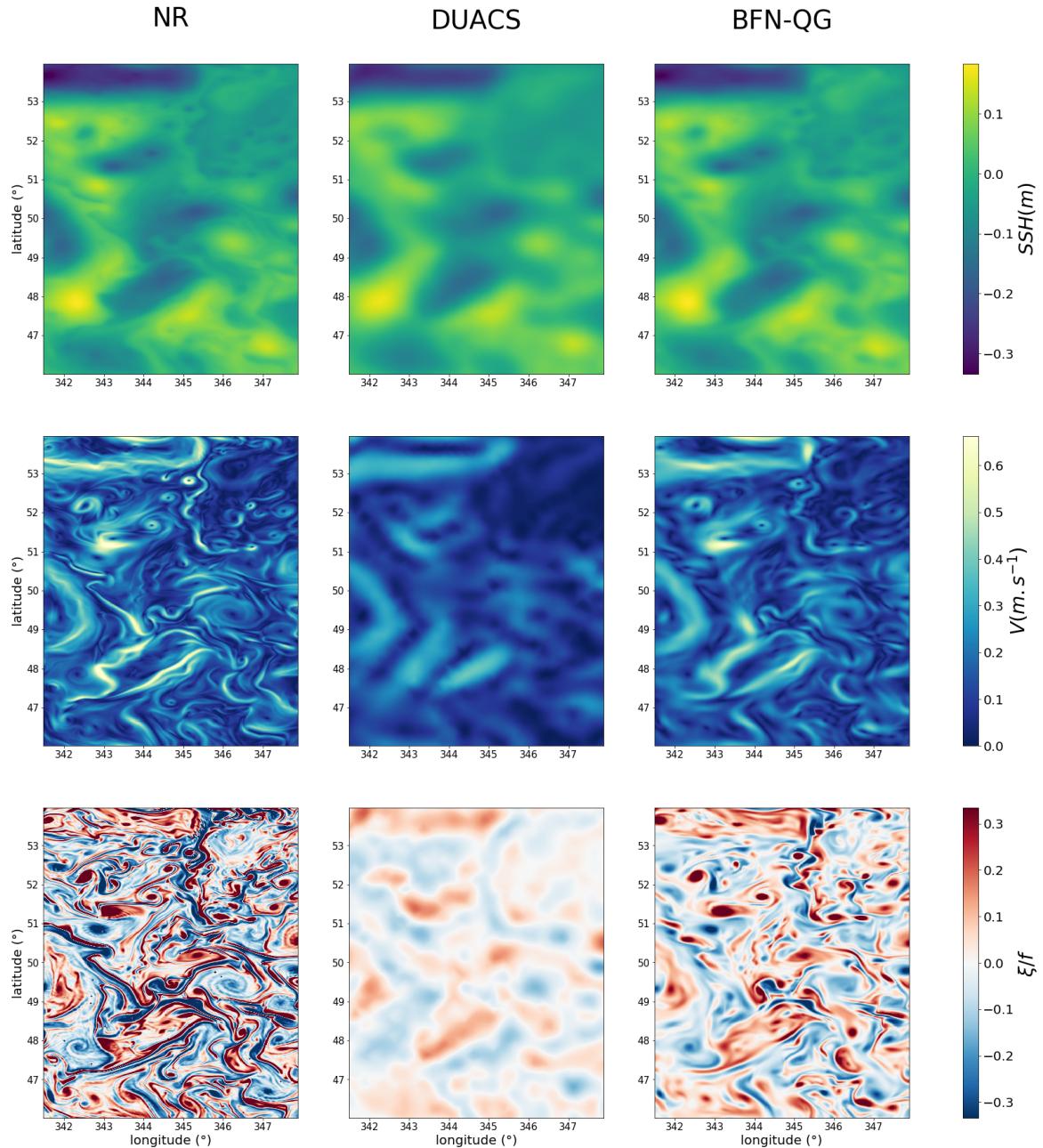


FIGURE 3.7 Snapshots of SSH (top), absolute geostrophic velocity (middle line) and normalized geostrophic relative vorticity (bottom) for the NR (left), DUACS (middle column) and BFN-QG (right) on May 26, 2013 in the OSMOSIS region. DUACS and BFN-QG are processing both nadir and SWOT data. Velocity and relative vorticity maps are computed on the native grids, i.e. before the interpolation to the $(1/60^\circ \times 1/60^\circ)$ grid of the NR.

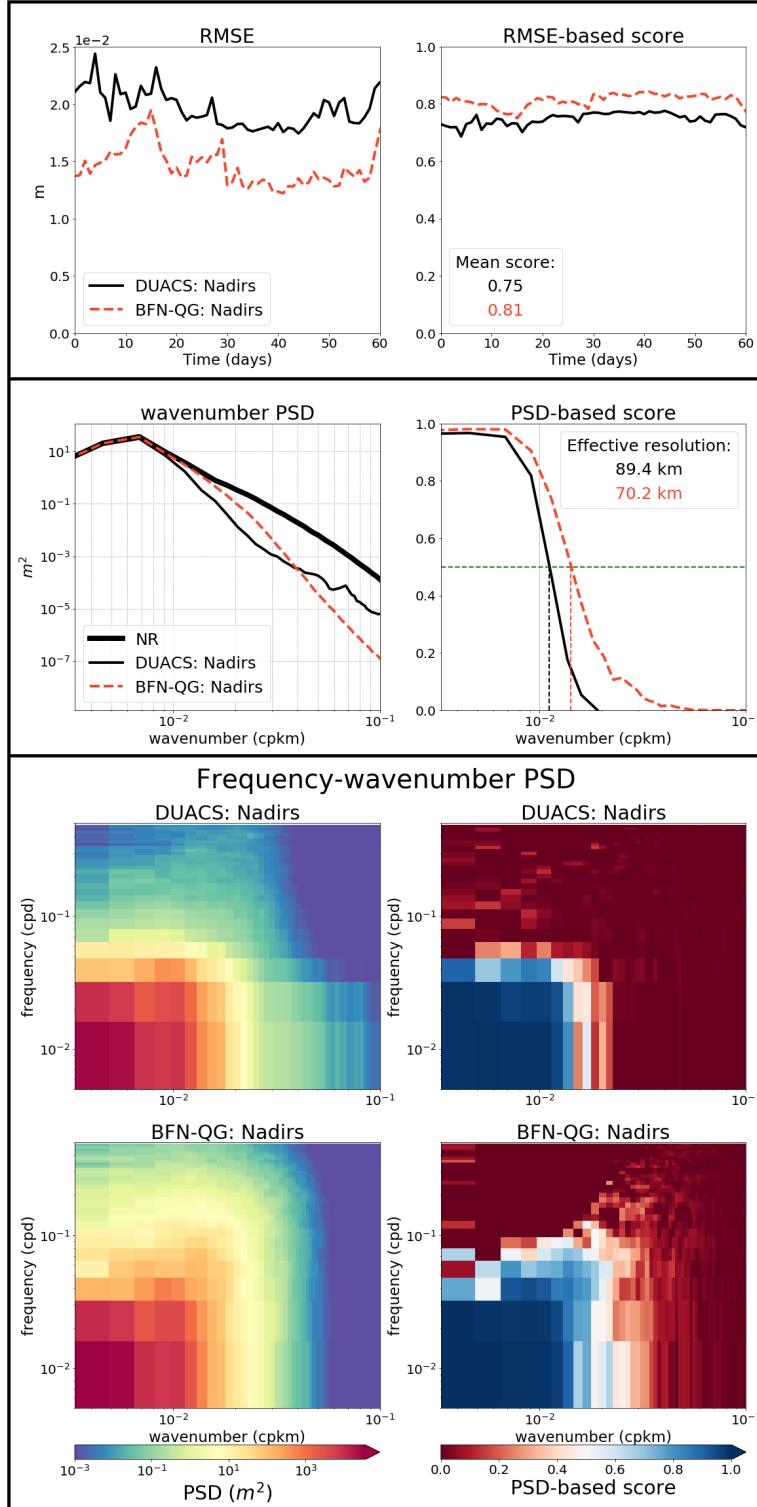


FIGURE 3.8 RMSE (top), wavenumber PSD (middle) and frequency-wavenumber PSD (bottom) on SSH, for DUACS and BFN-QG processing a constellation of 4 nadir altimeters in the OSMOSIS region during the 2 months period.

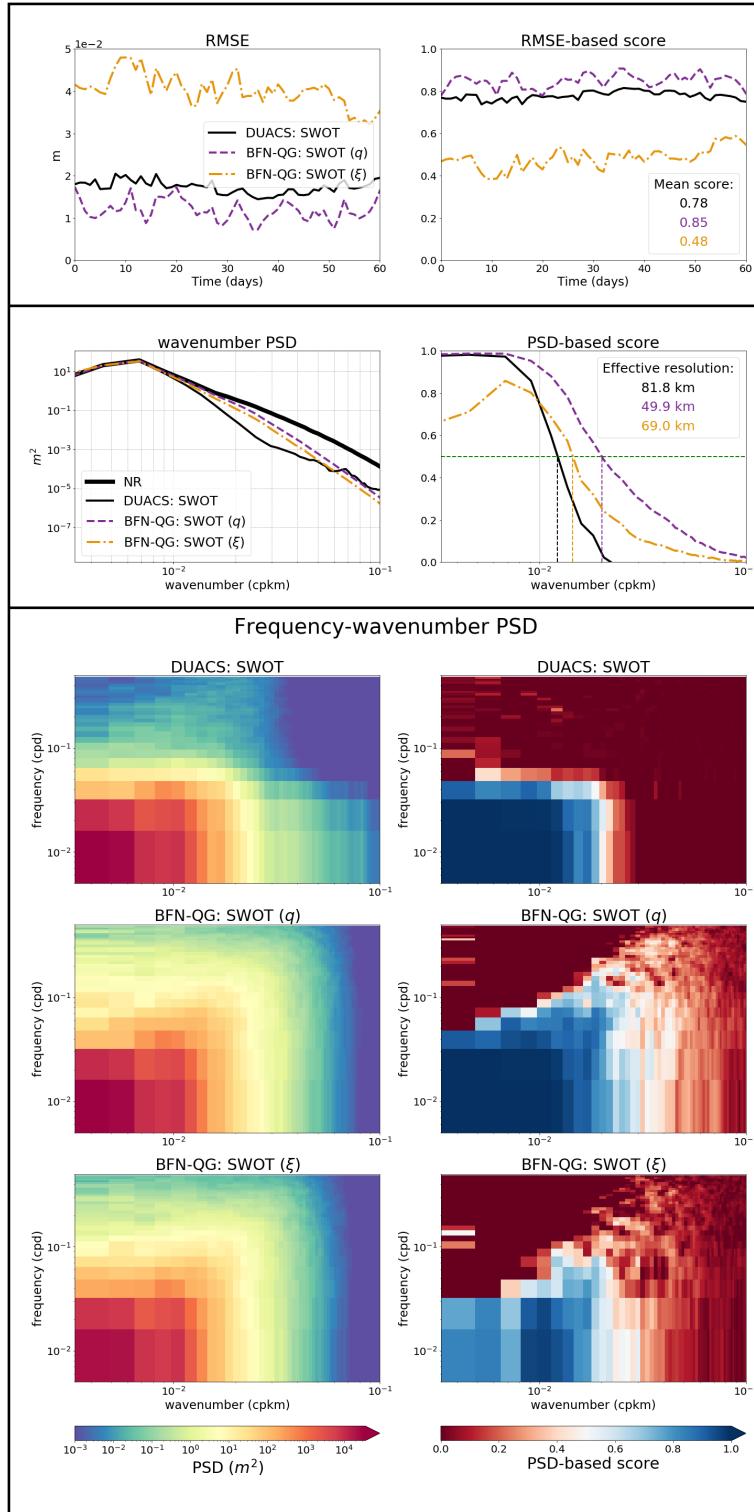


FIGURE 3.9 Same as Figure 3.8 with SWOT only instead of the nadir altimeters. The BFN-QG is performed by nudging SWOT data on PV (SWOT (q), purple dash line) or on relative vorticity (SWOT (ξ), orange dash line)

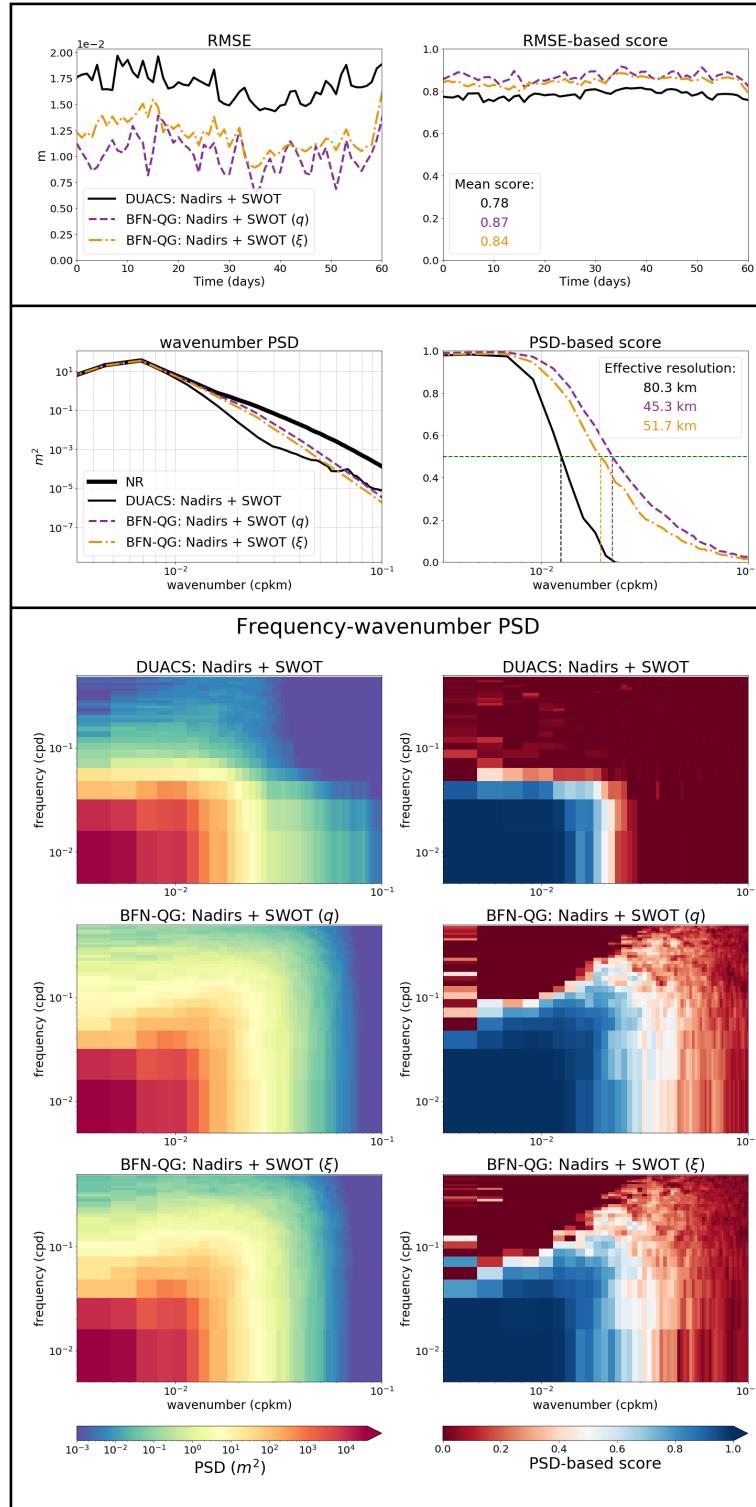


FIGURE 3.10 Same as Figure 3.9 with SWOT and nadir altimeters altogether.

Chapitre 4

Article 2 : Regional mapping of energetic short mesoscale ocean dynamics from altimetry : performances from real observations.

Résumé

Dans ce chapitre, nous introduisons un second article en préparation qui présente les performances du BFN-QG pour cartographier des données altimétriques réelles. Cette étude a été inspirée par le projet *World Ocean Circulation* (WOC ; <https://www.worldoceancirculation.org/>) de l'agence spatiale européenne (ESA) qui vise à améliorer l'estimation de la circulation dans les couches supérieures de l'océan.

Les performances du BFN-QG sont évaluées en OSE (cf. la section 2.3.2 du chapitre 2) avec des données indépendantes de SSH (fournies par un altimètre qui n'est pas utilisé pour la cartographie) et de vitesse (fournies par des bouées dérivantes, *drifters* en anglais) dans une région du courant des aiguilles. Comme dans le chapitre 3, les performances de cartographie sont comparées à celles obtenues par le système DUACS. Ce chapitre est l'occasion de présenter de nouveaux diagnostics sur les courants géostrophiques (déduits des cartes de SSH), en portant une attention particulière sur leur capacité à prévoir les trajectoires lagrangiennes.

Les résultats montrent que le BFN-QG permet de réduire nettement les erreurs de cartographie en comparaison à DUACS, et que cette réduction concerne essentiellement les structures énergétiques présentes dans la mésoéchelle inférieure à 500 km (tourbillons,

fronts). Le gain en résolution effective est de 30km, soit une amélioration relative de 20% par rapport à DUACS. Notons que ce gain en résolution est comparable au gain obtenu en OSSE dans le chapitre 3. Par ailleurs, les courants géostrophiques déduits des cartes de SSH du BFN-QG produisent de meilleures prévisions des trajectoires lagrangiennes pour des horizons temporels inférieurs à 10 jours par rapport à DUACS. Par contre, le BFN-QG peine à produire de meilleures performances que DUACS pour cartographier les grandes échelles spatiales ($>500\text{km}$) ainsi que pour prévoir les trajectoires lagrangienne au delà de 10 jours.

Les performances du BFN-QG sont considérablement réduites dans des régions où la dynamique équilibrée est faiblement énergétique. Ce résultat est en désaccord avec les conclusions du chapitre 3 où l'on observait une grande robustesse du BFN-QG vis à vis de l'intensité de la dynamique. Plusieurs pistes peuvent expliquer cette différence de performance observée en OSSE et OSE. D'une part, à l'inverse du chapitre 3, les observations réelles contiennent des erreurs de mesure en plus des erreurs de représentativité. Ces erreurs de mesures sont *a priori* indépendantes de l'intensité de la dynamique équilibrée. Ainsi, le rapport signal/bruit est probablement plus faible dans les régions de faible variabilité. A l'inverse du BFN-QG, les erreurs de mesures sont explicitement prescrites dans le système DUACS, ce qui peut expliquer les meilleures performances des produits DUACS dans ces régions. D'autre part, la simulation de référence utilisée en OSSE dans le chapitre 3 ne contenait pas le forçage des marées. Or, ces marées génèrent des ondes de marée interne qui peuvent dominer le signal de SSH dans les régions où la dynamique équilibrée est peu énergétique. La signature de ces ondes dans les observations altimétriques réelles peut alors expliquer la réduction de performances du BFN-QG. Dans le chapitre suivant, nous présenterons une méthode qui permet de cartographier conjointement les dynamiques équilibrée et de marée interne.

4.1 Introduction

Ocean circulation drives most of the global heat and mass transport, greatly impacting climate, biodiversity and human activities. In the open ocean, most of the kinetic energy is contained in mesoscale (50-500 km) structures (Ferrari and Wunsch, 2009). In particular, mesoscale eddies can transport heat and nutrients through very long distances and times (Fu et al., 2010).

Satellite altimetry is the only observing system capable of documenting mesoscale ocean geostrophic currents with consistent temporal and spatial resolution. By merging several altimetric datasets into gridded Sea Surface Height (SSH), geostrophic velocities can be derived (Ducet et al., 2000). Today, the commonly used gridded SSH maps are the DUACS products, distributed by the Copernicus Marine Environment Monitoring Service (CMEMS). The mapping algorithm is based on a space-time optimal interpolation (OI) of the available altimetric SSH satellite data (Le Traon et al., 1998). These maps resolve oceanic processes down to 150-200km in wavelength at mid-latitudes (Ballarotta et al., 2019).

The maps designed by the DUACS system provide little information about short mesoscale dynamics (<200 km). In fact, these fine scales are mostly governed by nonlinear dynamics, which makes the (linear) OI hardly effective. Yet, it is known from other observations and numerical models that these fine scales play a major role in ocean circulation (Su et al., 2018). Recent efforts have been made to improve the space-time resolutions of the SSH maps. Ubelmann et al. (2015) proposed to use a dynamical constraint, based on the conservation of the potential vorticity, in the OI procedure. This improved algorithm, called Dynamical Optimal Interpolation (DOI), has been tested with simulated (Ubelmann et al., 2016) and real conventional altimetric data (Ballarotta et al., 2020). The results show a better estimation of fine scale structures that are filtered out in the conventional DUACS system.

Motivated by the coming Surface Water and Ocean Topography (SWOT) mission, Le Guillou et al. (2021) have proposed an original data assimilation algorithm (called the Back and Forth Nudging) operating with a 1.5-layer quasi geostrophic model (the same as the one used in the DOI) to benefit from the high spatial resolution of SWOT, while compensating for its low temporal resolution, in the design of SSH maps. The technique, referred to as BFN-QG, has been tested in an Observatory Simulation System Experiment (OSSE) with simulated SWOT and conventional altimeter data. The authors have shown a net improvement of the resolutions of the maps both with conventional altimeter and SWOT data, in comparison with the DUACS algorithm.

In this paper, we continue the work of Le Guillou et al. (2021) by exploring the performances of the BFN-QG algorithm for mapping real conventional altimetry data. Both the BFN-QG and DUACS systems are applied in a study area that spans a part of the energetic

Agulhas current. The performances are assessed with independent SSH and *in situ* velocity data. The paper is organized as follows : first we recall the main features of the BFN-QG and its implementation with real SSH data ; second we present the experimental setup designed to assess the mapping performances ; third we report the performances both in mapping SSH and geostrophic current and finally we discuss the results by giving some perspectives for future works.

4.2 The BFN-QG algorithm

4.2.1 The QG dynamics

The dynamics of SSH is simulated by a 1.5-layer Quasi-Geostrophic (QG) model. This model simulates the dynamics of the first baroclinic mode, known to capture most of SSH variability. In this model, the conserved potential vorticity q is diagnosed from SSH :

$$q = \nabla^2 \psi - \frac{1}{L_D^2} \psi \quad (4.1)$$

with L_D the Rossby radius of deformation, $\nabla^2 = (\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2})$, and ψ the streamfunction such as :

$$\psi = \frac{g}{f} \text{SSH} \quad (4.2)$$

g being the gravity constant and f the Coriolis frequency.

The conservation of potential vorticity is written :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{u}_g \cdot \nabla q = 0 \quad (4.3)$$

where \mathbf{u}_g is the geostrophic velocity vector diagnosed from SSH :

$$\mathbf{u}_g = -\mathbf{k} \times \psi = -\frac{g}{f_0} \mathbf{k} \times \nabla \text{SSH} \quad (4.4)$$

\mathbf{k} denotes the vertical direction and $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$.

4.2.2 Formulation with Sea Level Anomalies

In reality, an altimeter only provides accurate observations of the time-fluctuating part of SSH, called Sea Level Anomaly (SLA). The time-averaged of SSH, called Mean Dynamical Topography (MDT) is computed with the combination of *in situ* data and other satellite

observations (Mulet et al., 2021). Then we have :

$$SSH = MDT + SLA \quad (4.5)$$

To formulate the QG dynamics with the SLA variable, we decompose the geostrophic flow and the potential vorticity using the Reynolds decomposition :

$$\mathbf{u}_g = \bar{\mathbf{u}}_g + \mathbf{u}'_g \quad (4.6a)$$

$$q = \bar{q} + q' \quad (4.6b)$$

where $\bar{\mathbf{u}}_g$ and \bar{q} stand for the mean components (SLA-independent) and \mathbf{u}'_g and q' the time-fluctuating components (diagnosed from SLA).

The prognostic equation for the potential vorticity fluctuation is then :

$$\frac{\partial q'}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}}_g \cdot \nabla q' + \mathbf{u}'_g \cdot \nabla \bar{q} + \mathbf{u}'_g \cdot \nabla q' = 0 \quad (4.7)$$

4.2.3 Data assimilation

The SLA observations (denoted as SLA^{obs}) are assimilated in the QG model with the Back and Forth Nudging (BFN) technique. This technique is based on the nudging strategy, which consists in "gently" pulling the model trajectory towards the observations. Mathematically, an extra term proportional to the difference between the model SLA and the observations is added in Eq. 4.7 :

$$\frac{\partial q'}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}}_g \cdot \nabla q' + \mathbf{u}'_g \cdot \nabla \bar{q} + \mathbf{u}'_g \cdot \nabla q' = K(SLA^{obs} - SLA) \quad (4.8)$$

where K is the tunable nudging coefficient. Its value determines the balance between the weights given to the observations and the QG dynamics.

The BFN algorithm calls iteratively the forward nudging, defined as a forward-in-time propagation of Eq.4.8 with $K>0$, and the backward nudging, defined as a backward-in-time propagation of Eq.4.8 with $K<0$, within a fixed temporal window. At the beginning of each temporal loop, the SLA variable is initialized with the value estimated from the previous loop. In a few iterations (less than 20), the BFN converges towards a trajectory that both fits the observations and the model dynamics. For more details on the BFN technique, the reader can refer to Le Guillou et al. (2021).

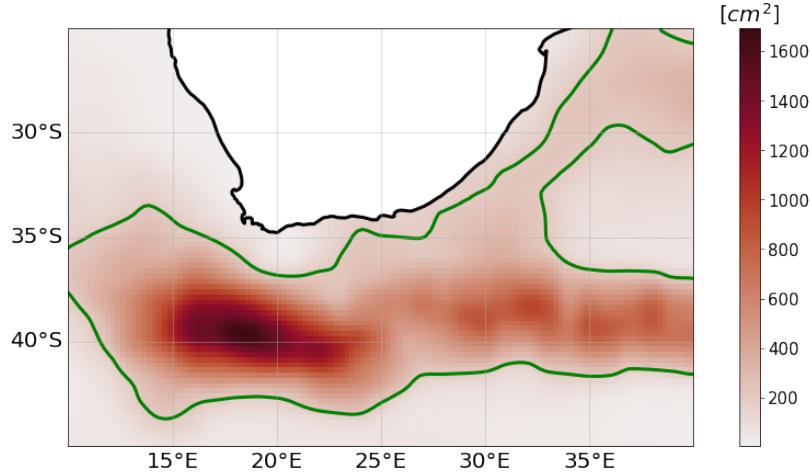


FIGURE 4.1 Mean variance of SSH computed from DUACS L4 product on the study region. The green contour is the 200 cm^2 SSH variance contour.

4.3 Experimental set-up

4.3.1 Study area and input data

We assess the BFN-QG performances in a part of the Agulhas current ($10\text{--}40^\circ\text{E}$, $25\text{--}45^\circ\text{S}$). Figure 4.1 shows the mean variance of SSH in the study region computed from the DUACS L4 products for the year 2019. The Agulhas current is the major western boundary current of the Southern Hemisphere, transporting large volumes of water from the Indian to the Atlantic ocean, greatly impacting climate (Bryden et al., 2005) and vessel trajectories (Le Goff et al., 2021).

We use the along-track L3 filtered SLA products from the following missions : Jason-3, Sentinel-3A, Sentinel-3B, HaiYang-2, CryoSat-2 and SARAL/AltiKa. These SLAs have been distributed by CMES (<http://marine.copernicus.eu/>) within a reprocessing of 25 years of altimetric data (Taburet et al., 2019). For our analysis, we use the spatially filtered data, whose cutoff has been set to 65km, corresponding to altimeters' effective resolution (Pujol et al., 2016).

The BFN-QG is run from December 1, 2018 to January 31, 2020. The performances are assessed only for the year 2019. The first and last month of the experimental time period are used for the spin-up of the BFN-QG system.

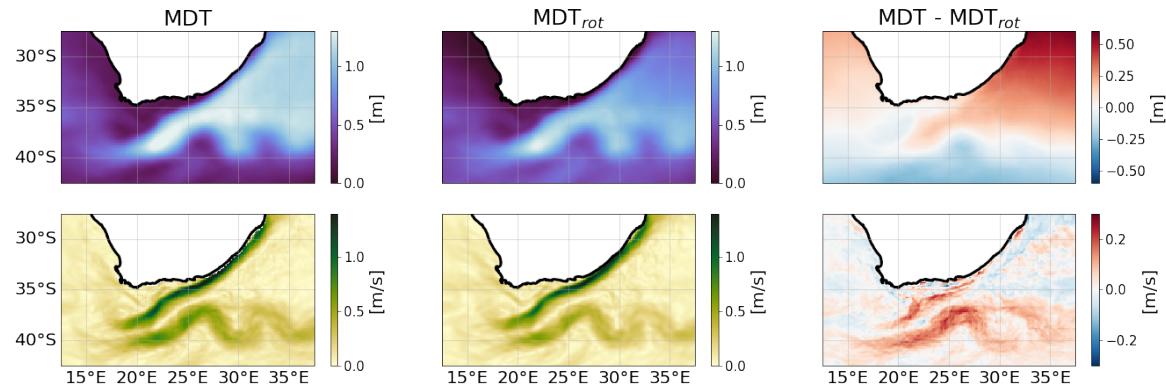


FIGURE 4.2 Top : raw MDT field (left), its rotational part (middle) and the difference between the two (right). Bottom : absolute geostrophic velocity computed from the associated top fields using Eq.4.4.

4.3.2 Mean geostrophic current

The mean state of the ocean surface needed to advect the QG potential vorticity anomaly q' through equation 4.3 are extracted from the CNES-CLS18 mean dynamic products (Mulet et al., 2021). In this product, the topography (MDT) and velocity (MDV; for Mean Dynamical Velocity) are estimated with a multivariate objective analysis of a combination of altimeter and space gravity data, *in situ* measurements and models. A central step of the analysis lies in the filtering of the ageostrophic component of the *in situ* velocity measurements.

In Eq. 4.7, both $\bar{\mathbf{u}}_g$ and \bar{q} have to be prescribed. Because $\bar{\mathbf{u}}_g$ has to be purely geostrophic for the QG model to be accurate, we prescribe its value with the rotational part of MDV, called MDV_{rot} (bottom middle panel on figure 4.2). Note that, at the time of this study, we do not understand why MDV is not purely rotational (i.e. purely geostrophic). Then, for consistency, \bar{q} is diagnosed through Eq. 4.1 by the corresponding MDT_{rot} (top middle panel on figure 4.2), estimated from MDV_{rot} with a gradient conjugate method. At the end of the mapping processing, we add the full MDV to the estimated velocity anomalies.

4.3.3 Performances assessment strategies

We compare the performances of the BFN-QG system and the DUACS DT2018 system (Taburet et al., 2019). We use the global daily product provided by CMEMS on a 0.25° longitude x 0.25° latitude grid. The BFN-QG is run on a 0.1° longitude x 0.1° latitude grid and the output maps are saved every 3hrs.

The comparison focuses on SLA (hereafter called SLA-mapping) and geostrophic currents (hereafter called U-mapping). We use independent datasets, i.e. not used in the mapping

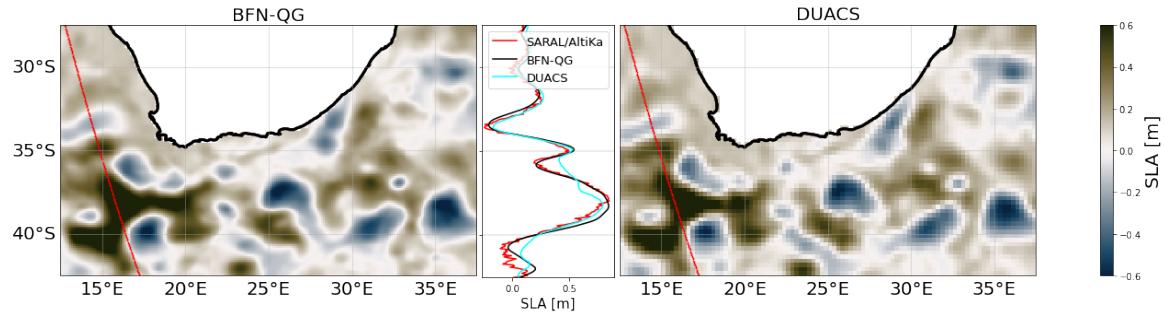


FIGURE 4.3 SLA mapped by the BFN-QG (left) and DUACS (right) systems on the 15 October 2019. The red lines represent the track of the independent SARAL/AltiKa altimeter at this date. The middle panel of the figure compares the 1D SLA profile of the independent with the estimated SLAs interpolated on the track location.

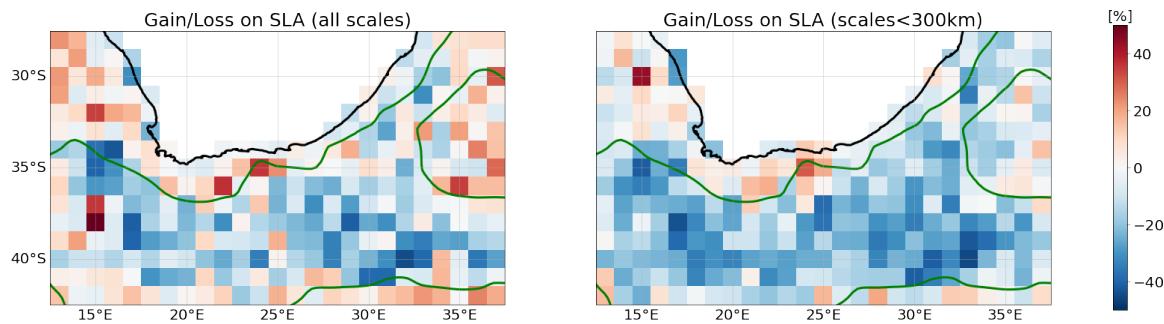


FIGURE 4.4 Geographical distribution of the gain/loss ratio R for all spatial scales (left), and scales below 300km (right). Negative values (blue) indicate better performances for the BFN-QG method compared to DUACS. The green contour is the 200 cm^2 SSH variance contour.

procedure, as ground truth. For assessing the SLA-mapping capability, we exclude SARAL/AltiKa of the altimetric observation network to use it as independent data. For assessing the U-mapping capability, all the available altimetric observation network is used and the validation is performed with independent drifter data.

4.4 SLA-mapping performances

The SLA-mapping performances are assessed by comparing the mapped products with the independent altimetric data. The method is the same as in Ballarotta et al. (2020). The gridded maps \widehat{SLA} are interpolated on the locations of the independent measurements SLA^{ind} . Figure 4.3 shows an example of two maps estimated by the BFN-QG and DUACS systems and a track of the independent satellite. As the independent data are sparse, the differences $\Delta SLA = \widehat{SLA} - SLA^{ind}$ are aggregated in 1° longitude x 1° latitude boxes to give a spatial

distribution of the errors. For each box, we compute the root mean square errors (RMSEs) :

$$RMSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta SLA[i]^2 \quad (4.9)$$

where N is the number of independent observations in a specific grid box. Before computing the RMSE, we can apply a spatial filtering on ΔSLA to isolate frequency bands of interest, e.g. to focus on the errors made on small or large spatial scales. The comparison of the performances of the BFN-QG versus DUACS is then given by the gain/loss ratio R :

$$R = \frac{RMSE_{BFN-QG} - RMSE_{DUACS}}{RMSE_{DUACS}} \quad (4.10)$$

A spectral analysis has been performed to estimate the spatial-scale distribution of the performances. The analysis is applied on the reconstructed SLAs interpolated on the independent tracks. The methodology is the same as in Ballarotta et al. (2020)). Each independent satellite track in the study area is split in 800-km-length segments overlapping every 200km. The data along the segments are then detrended and a Hanning window is applied. We use the Welch (Welch, 1967) method to compute the power spectral density (PSD) distribution for each segments. We average the PSDs for all segments to get a statistically robust estimation of the energy distribution among spatial scales. We compute also the wavelength-dependent PSD score, $SPSD$, defined as :

$$SPSD = 1 - \frac{PSD(\Delta SLA)}{PSD(SLA^{ind})} \quad (4.11)$$

$SPSD$ is equal to one for a perfect reconstruction and zero when the error is as energetic as the observed oceanic signal. The effective resolution of the maps is defined as the spatial scale for which the spectral score is equal to 0.5. Figure 4.5 shows the PSDs of the mapped product and the independent data, as well as the associated scores.

The BFN-QG considerably improves the mapping of energetic mesoscale structures compared to DUACS. The improvement of the mapping accuracy occurs mainly for scales below 300km (left panel of figure 4.4), with an average reduction of the errors of 11.4%. This is corroborated by the spectral analysis which shows that the BFN-QG maps are in better agreement (both in amplitude and phase) with the independent data especially for scales below 300km. The effective resolution of the maps is improved by a factor of 20% compared to DUACS.

The performances of the BFN-QG are reduced for larger spatial scales and in low variability regions. For scales higher than 300km, DUACS outperforms the BFN-QG on

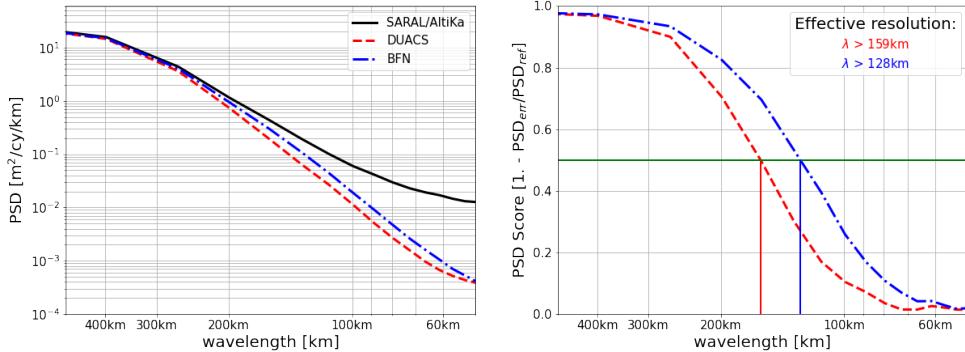


FIGURE 4.5 Spectral diagnostics : PSD (left) and associated scores (right) of the mapped products. The intersections between the horizontal green line (corresponding to a PSD score of 0.5) and the curves define the effective resolutions of the products.

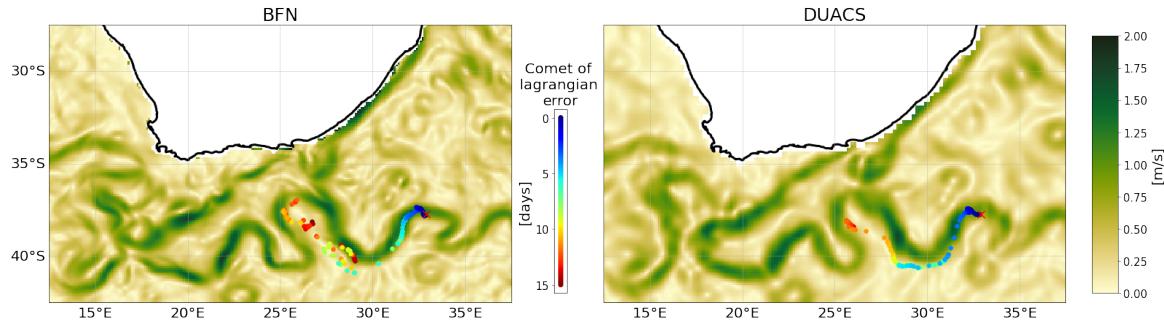


FIGURE 4.6 Geostrophic currents mapped by the BFN-QG (left) and DUACS (right) systems on the 2 November 2019. The red cross represents the location of one drifter at this date. The colored dots represent the expected drifter positions as predicted from the true past positions with the mapped currents. Dots' color indicates the prediction lead time. For example, the yellow dots are predictions initialized 9 days in the past. Their distances to the red cross indicate the prediction errors.

average by a factor of 1.3% (not shown). For all scales, the performances of the BFN-QG are reduced in low variability regions (delimited by the green lines in figure 4.4).

4.5 U-mapping performances

The U-mapping performances are assessed by comparing the mapped geostrophic velocities with independent drifter data. Figure 4.6 illustrates two snapshots of the norm of mapped geostrophic velocities from the BFN-QG and DUACS systems and the position of one drifter at this date. We perform both Eulerian and Lagrangian diagnostics. For the Eulerian diagnostics, we use the same methodology as for the SLA-mapping performances : the

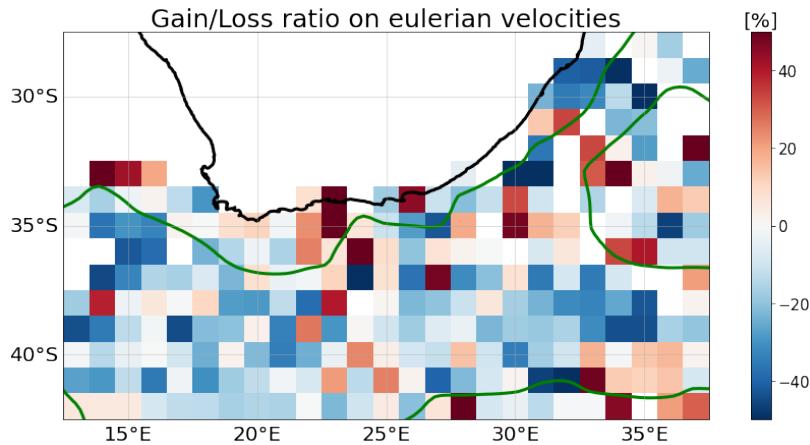


FIGURE 4.7 Geographical distribution of the gain/loss ratio R for the estimating the norm of velocities. As for figure 4.4, negative values (blue) indicate better performances for the BFN-QG method compared to DUACS. The green contour is the 200 cm^2 SSH variance contour. Note that the blank area in the north-west part of the study area is due to missing drifter data in this region.

mapped velocities are interpolated on the drifters' locations and the errors with the observed independent velocities are aggregated in 1° longitude $\times 1^\circ$ latitude boxes. The RMSE and the gain/loss ratio are then computed in each box. For the Lagrangian diagnostics, we compare simulated drifters' trajectories with the real ones. More precisely, we compute the distances between each drifter's location and the expected locations obtained by advecting the drifter by the mapped velocities from past locations (with forecast lead times ranging from 0 to 15 days, every 3 hours).

The BFN-QG improves the mapping of energetic geostrophic currents compared to DUACS. Qualitatively, figure 4.6 shows that the currents estimated by the BFN-QG depict fine scale structures (filaments and small vortices) that are not present on the currents estimated by DUACS. Quantitatively, the accuracy of the velocity estimation, both in norm (figure 4.7) and in direction (not shown), is improved in average. This improvement is more pronounced in high variability regions, as shown by the intensification of blue pixels in the inner domain delimited by the green contour on figure 4.7. Some pixels are white, meaning that no drifter has been transported in these regions. A validation with more drifter data, i.e. based on an experimental time period of several years, would be relevant to get more robust statistics.

The geostrophic currents derived from the BFN-QG SLA maps improve the prediction of short-term Lagrangian transport, in comparison with the DUACS-derived geostrophic currents. Qualitatively, figure 4.6 shows that the blue dots, representing Lagrangian predictions with lead time up to 5 days, are much closer to the real location of the drifter for the BFN-QG

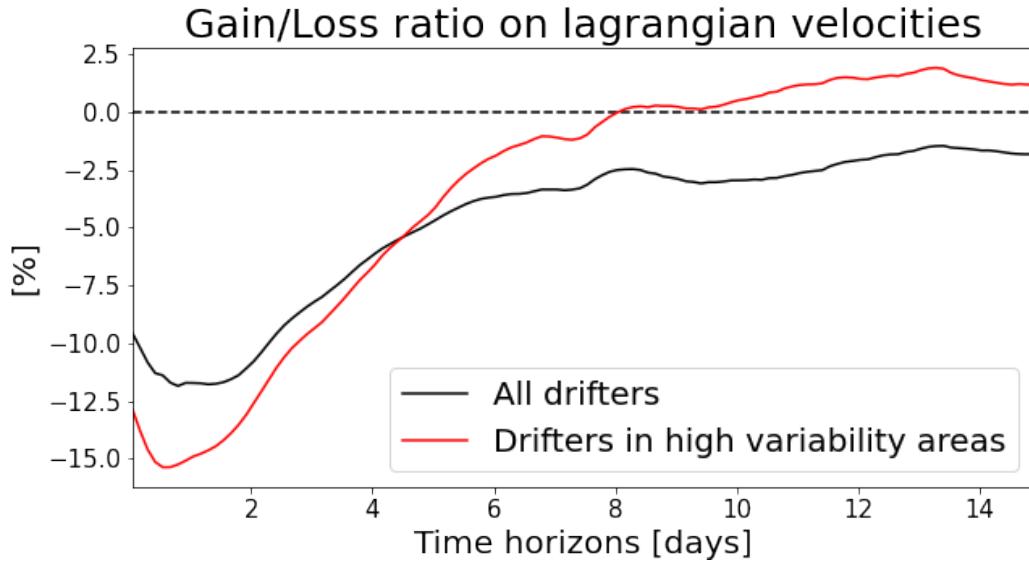


FIGURE 4.8 Gain/loss ratio on the predictability of mapped surface geostrophic current for estimating Lagrangian transport, in function of the time horizon of the prediction. Negative values indicate better performances for the BFN-QG method compared to DUACS. In black, all the drifter available in the experimental time period are considered. In red, only the drifter located in the high variability regions are considered.

system than for DUACS. However, the red dots, representing Lagrangian predictions from 10 to 15 days, are as far as the ones predicted by DUACS. Quantitatively, figure 4.8 shows that the BFN-QG improves the Lagrangian prediction by more than 10% for 1–3 days lead times compared with DUACS, with an enhanced improvement for drifters located in high variability regions. However, for longer lead times, the improvement is considerably reduced and even negative for drifters located in high variability regions. Besides, the standard deviation of the Lagrangian errors (not shown) is higher for the BFN-QG than for DUACS, and this is accentuated for long lead times. This is qualitatively visible on figure 4.6 where the distances between the expected locations and the real location of the drifter increase linearly with the lead times for DUACS while they are much more scattered for the BFN-QG (especially for lead times higher than 10 days).

4.6 Discussion and conclusions

In this study, we follow on the analysis presented in Le Guillou et al. (2021) for assessing the performances of the BFN-QG to map altimetry data. The BFN-QG is an original data assimilation technique that can be used to dynamically map altimetry data. This dynamical mapping technique shares similarities with the DOI experimental mapping technique (Balla-

rotta et al., 2020; Ubelmann et al., 2016). The major advantage of the BFN-QG technique over the DOI technique is the very limited number of parameters to tune and its relatively low numerical cost. In Le Guillou et al. (2021), we considered simulated observations for testing the impact of the SWOT mission on the mapping capabilities. Here, the BFN-QG is tested to map real altimetry data in a region covering a part of the highly energetic Agulhas current. The performances are assessed by comparing the mapped products (from BFN-QG and DUACS) with independent datasets. We have carried out diagnostics on mapped SLA (involving an independent altimeter) and mapped velocity (involving independent drifters).

The BFN-QG improves the mapping of energetic short mesoscale structures both in space and time in comparison with the DUACS system. The BFN-QG is able to reconstruct finer coherent structures that are in phase with observations from independent datasets. The spatial effective resolution is improved by a factor of 20% in comparison with DUACS. The prediction of Lagrangian transport by the BFN-QG-derived geostrophic currents is improved by a factor of 10% for lead times below 5 days in comparison with the DUACS-derived geostrophic currents.

The performances of the BFN-QG are not uniform for all temporal and spatial scales. The method fails to improve the mapping of large mesoscale structures ($>300\text{km}$) in comparison with DUACS. This is corroborated by the poor performances of the BFN-QG-derived currents to estimate the Lagrangian transport for lead times larger than 10 days. Future works should investigate the implementation of a multi-scale nudging whose the parameters vary with the space and time scales of the dynamics (Stauffer and Seaman, 1994). This would prevent departure from large scale circulation while maintaining the accuracy of the mapping of small scales.

Another issue with the BFN-QG lies in its poor performances in mapping low energetic dynamics. This disagrees with the previous study of Le Guillou et al. (2021) which showed similar performances in low and high variability regions. One difference here is that the observations contain measurement noise that may become important in low variability region. A workaround would be to reduce the impact of observations on the dynamics (by reducing the nudging coefficient K) in these regions. Another difference with the study of Le Guillou et al. (2021) is that the observations can contain the signature of internal tides, which can be strong (even dominant) in low variability regions (Qiu et al., 2018). A natural perspective should be to test the method presented in Le Guillou et al. (2021) to jointly map internal tides and balanced motions from real altimetric observations.

Chapitre 5

Article 3 : Joint Estimation of Balanced Motions and Internal Tides From Future Wide-Swath Altimetry.

Résumé

Dans ce chapitre, nous insérons un article publié dans le *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, qui se focalise sur la problématique de la séparation ondes-tourbillons à partir de données 2D de SSH, comme le seront celles fournies par le satellite SWOT.

Nous avons développé une méthode de minimisation alternée qui permet de combiner deux algorithmes de cartographie, chacun spécifique à l'estimation d'une dynamique (équilibrée ou de marée interne), dans un processus itératif, pour estimer conjointement la signature en SSH des deux classes de mouvement. À chaque itération, l'une des deux dynamiques est estimée en traitant de nouvelles observations calculées en retranchant l'estimation de l'autre dynamique aux observations initiales. La signature de la dynamique qui n'est pas ciblée par un des deux algorithmes de cartographie est censée s'atténuer au cours des itérations, ce qui permet d'affiner l'estimation de la dynamique ciblée.

Bien que l'implémentation de la méthode de minimisation alternée soit indépendante du choix des algorithmes de cartographie propres à chaque dynamique, son efficacité dépend de la capacité de chaque algorithme à filtrer (ne serait-ce que partiellement) la signature de la dynamique non ciblée. Comme la dynamique de marée interne n'est pas compatible avec la dynamique QG, la composante équilibrée de la SSH est estimée par le BFN-QG. En ce qui concerne la dynamique de marée interne, nous avons développé un 4Dvar (cf. la section 2.2.2 du chapitre 2) associé à un modèle Shallow-Water (SW) linéaire à une couche et demie

(cf. la section 2.1.3 du chapitre 2). Cet algorithme de cartographie est dénommé 4Dvar-SW par la suite. Le modèle n'est forcé que par des conditions aux frontières simulant l'entrée et la sortie d'ondes internes, oscillant à la fréquence fixe de marée, ce qui permet d'éviter l'excitation du mode géostrophique. Le vecteur de contrôle est constitué des conditions aux frontières (phase et amplitude des ondes entrantes) et du paramètre H_e du modèle SW qui module la dynamique ondulatoire en impactant la direction, la vitesse et la longueur d'onde des trains d'onde entrant. Les variations temporelles des paramètres de contrôle permettent de générer des ondes non stationnaires qui, on le sait, représentent une part non négligeable (voire majoritaire dans certaines régions) de la dynamique de marée interne. La minimisation de la fonction coût du 4Dvar est effectuée en exprimant le vecteur de contrôle dans une base réduite (c.f. la section 2.2.3 du chapitre 2) composée de fonctions gaussiennes dont les extensions spatiales et temporelles sont choisies de façon à reproduire la variabilité de la dynamique ondulatoire avec un minimum de degrés de liberté.

Cette étude se voulant être une preuve du concept, la méthode de minimisation alternée est testée en OSSE dans un contexte idéalisé, caractérisé par une simulation de référence idéalisée et des observations idéalisées. La simulation de référence propage le premier mode barocline d'une composante de marée interne semi-diurne à travers un écoulement équilibré de mésoéchelle. Les observations sont extraites à intervalles de temps réguliers de quelques jours sur tout le domaine. La dynamique simplifiée de la simulation de référence permet de décomposer aisément les champs de SSH en une composante équilibrée et une composante de marée interne. Ces deux composantes de référence servent à évaluer les performances des cartes de SSH estimées par le BFN-QG et le 4Dvar-SW au terme du processus itératif de la minimisation alternée.

Les résultats montrent que la méthode de minimisation alternée permet d'estimer près de 80% de la signature des dynamiques équilibrée et de marée interne. Les 20% restant concernent majoritairement la signature de dynamiques non résolues par les modèles QG et SW, par exemple les dynamiques de modes baroclines supérieurs. Nous justifions que l'emploi de la minimisation alternée a un réel intérêt par rapport à l'utilisation indépendante des deux algorithmes de cartographie. De plus, cette méthode reconstruit près de 50% des ondes non stationnaires de la marée interne. Ce résultat est très encourageant pour l'exploitation future des données SWOT.

Dans cette étude, nous montrons que l'échantillonnage temporel des observations est déterminant pour estimer correctement la dynamique de marée interne, et par extension la dynamique équilibrée. En effet, les performances sont considérablement réduites lorsque le pas de temps entre deux observations est proportionnel à une demie période de marée.

Dans ce cas critique, toujours la même phase du champ d'onde est observée, ce qui empêche d'observer la propagation des ondes.

Bien que cette étude soit idéalisée, elle permet d'exposer clairement le problème de séparation des dynamiques équilibrée et de marée interne à partir des données SWOT, et justifie l'utilisation de méthodes d'assimilation de données bien choisies pour faciliter la séparation. Désormais, il nous faut traiter cette même problématique dans un contexte expérimental réaliste, avec une physique ondulatoire plus complexe et des observations échantillonnées sur des orbites réelles. Ceci est l'objet du chapitre suivant.



RESEARCH ARTICLE

10.1029/2021MS002613

Key Points:

- We present a dynamical method that estimates and separates balanced motions (BMs) and internal tides (ITs) from sea surface height data
- The method uses iteratively two data assimilation techniques, each specific to the estimation of one component (BMs or ITs)
- Although idealized, this study shows encouraging results for the disentanglement of BMs and ITs signature on future wide-swath altimetry data

Correspondence to:

F. Le Guillou,
florian.leguillou@univ-grenoble-alpes.fr

Citation:

Le Guillou, F., Lahaye, N., Ubelmann, C., Metref, S., Cosme, E., Ponte, A., et al. (2021). Joint estimation of balanced motions and internal tides from future wide-swath altimetry. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 13, e2021MS002613. <https://doi.org/10.1029/2021MS002613>

Received 11 MAY 2021
Accepted 21 NOV 2021

Joint Estimation of Balanced Motions and Internal Tides From Future Wide-Swath Altimetry

Florian Le Guillou¹ , Noé Lahaye² , Clément Ubelmann³, Sammy Metref¹, Emmanuel Cosme¹, Aurélien Ponte⁴ , Julien Le Sommer¹, Eric Blayo⁵, and Arthur Vidard⁵ 

¹Université Grenoble Alpes, CNRS, IRD, Grenoble INP, IGE, Grenoble, France, ²Inria & IRMAR, Campus Universitaire de Beaulieu, Rennes, France, ³Ocean Next, Grenoble, France, ⁴Université de Brest, CNRS, IRD, Ifremer, Laboratoire d’Oceanographie Physique et Spatiale (LOPS), IUEM, Brest, France, ⁵Université Grenoble Alpes, CNRS, INRIA, Grenoble INP, LJK, Grenoble, France

Abstract Wide-swath altimetry, for example, the Surface Water and Ocean Topography mission is expected to provide Sea Surface Height (SSH) measurements resolving scales of a few tens of kilometers. Over a large fraction of the globe, the SSH signal at these scales is essentially a superposition of a component due to balanced motions (BMs) and another component due to internal tides (ITs). Several oceanographic applications require the separation of these components and their mapping on regular grids. For that purpose, the paper introduces an alternating minimization algorithm that iteratively implements two data assimilation techniques, each specific to the mapping of one component: a quasi-geostrophic model with Back-and-Forth Nudging for BMs, and a linear shallow-water model with 4-Dimensional Variational assimilation for ITs. The algorithm is tested with Observation System Simulation Experiments where the truth is provided by a primitive-equation ocean model in an idealized configuration simulating a turbulent jet and mode-one ITs. The algorithm reconstructs almost 80% of the variance of BMs and ITs, the remaining 20% being mostly due to dynamics that cannot be described by the simple models used. Importantly, in addition to the reconstruction of stationary ITs, the amplitude and phase of nonstationary ITs are reconstructed. Sensitivity experiments show that the quality of reconstruction significantly depends upon the timing of observations. Although idealized, this study represents a step forward towards the disentanglement of BMs and ITs signals from real wide-swath altimetry data.

Plain Language Summary Wide-swath altimetry, for example, the Surface Water and Ocean Topography mission is expected to provide Sea Surface Height (SSH) images with pixels of 2 km, revealing motions at scales of a few tens of kilometers. At these scales, SSH variations are essentially due to the superposition of slow, balanced motions primarily constrained by Earth's rotation, and fast, propagating motions due to internal waves mainly generated by interactions between bathymetry and tidal water displacements. Several oceanographic applications require the separation of these two SSH components and their mapping on regular grids. This paper presents an original method to achieve this separation, based on data assimilation approaches and simple dynamical models. Experiments with synthetic SSH images, simulated from an ocean circulation model with detailed physics, show the efficiency of the method.

1. Introduction

For more than 25 years, altimetry has allowed the study of near-global sea surface height (SSH) at scales longer than 150 km and drastically transformed our understanding of mesoscale processes in the oceans. In particular, altimetry has given access to the upper-ocean circulation dynamics through geostrophy and revealed that most kinetic energy in the world ocean is contained in mesoscale eddies with wavelengths between 100 and 300 km (Wunsch & Ferrari, 2004). But the scales resolved by nadir (along-track) altimetry are limited by the 100–300 km spacing between satellite ground tracks. Even by merging several nadir measurements (Taburet et al., 2019), the space time resolution of the resulting 2D SSH maps does not allow to conveniently characterize and study small mesoscale (<150 km) motions (Amores et al., 2018; Ballarotta et al., 2019).

With wide-swath radar interferometry, the next generation of altimeters will provide two dimensional SSH data at much finer scales. For instance, the future Surface Water and Ocean Topography (SWOT) mission (Morrow et al., 2019) will provide SSH observations over a 120 km-wide swath with a near-global coverage, resolving spatial scales down to 15–30 km depending on the sea state (Fu & Ubelmann, 2014). Recent studies, based

on numerical models, have highlighted the impacts of short-mesoscale and submesoscale processes on ocean dynamics. Submesoscale motions have been found to trigger a large part of vertical motions (Klein & Lapeyre, 2009; McWilliams, 2016) that drive the exchanges of heat, carbon and nutrients between the ocean surface and subsurface. Small mesoscale processes (<100 km) also provide kinetic energy to larger scales through an inverse cascade (Ajayi et al., 2019; Capet et al., 2016), hence impacting the mesoscale dynamics. Wide-swath altimetry represents a unique opportunity to validate our present-day understanding of submesoscale motions and their role in oceanic processes in a broad sense.

At the scales measured by wide-swath altimetry, some SSH variations due to internal tides (ITs) may become comparable to those due to the mesoscale balanced motions (BMs; Qiu et al., 2018). ITs, producing high frequency sea level fluctuations at scales around 200 km and below, are internal gravity waves generated when the barotropic tidal flow encounters variations of topography (Garrett & Kunze, 2007). Although the generation processes of ITs are well understood, the dissipation processes (that greatly influence the ocean's energy budget; e.g., Whalen et al., 2020) remain insufficiently known and quantified. Recent studies emphasize that ITs and BMs interact in a complex way (Kelly & Lermusiaux, 2016), with BMs scattering and refracting ITs (Dunphy et al., 2017). These complex interactions are thought to strongly modify local mixing but need to be validated with observations. The capacity of wide-swath altimetry to observe even a part of ITs SSH signal will help to better understand these interactions and the processes related to ocean mixing and dissipation.

The accurate characterization of both ITs and BMs from wide-swath altimetry data, in the small mesoscale spectrum where their signatures overlap, will require scientific and technological developments for the processing of observations. The first challenge concerns the design of gridded products. For BMs, the main objective is to increase the space-time resolution of the present-day SSH maps. For instance, the mismatch between the (high) spatial and (low) temporal sampling of SWOT fosters the development of innovative inversion techniques, which typically include dynamical constraints (Ubelmann et al., 2015). For ITs, the main objective is to map the incoherent part of the signal, that is, the part due to waves whose characteristics have been altered by interactions with BMs and stratification variations. This is further developed in the next paragraph. The second challenge consists in the separation of ITs and BMs components from wide-swath altimetry data to make the differentiated gridded products possible. Both components are driven by different dynamics, and separation is needed to properly estimate quantities associated with each (e.g., surface currents for tracer advection, or energy dissipation due to waves). Separation is also made difficult by geographical and seasonal variations in the spatial scales and the relative strength of ITs and BMs (Qiu et al., 2018).

Disentangling the contribution of BMs and ITs on SSH is still an unsolved challenge. Due to its partial sampling in space and time, altimetry does not capture the fast SSH pulsation due to ITs. Stationary ITs (which are phase-locked to the astronomical forcing) can be mapped by harmonic analysis of long time series (>10 years) of conventional nadir altimetry data (Ray & Zaron, 2016). ITs become non stationary when interacting with BMs (Dunphy et al., 2017; Ponte & Klein, 2015) and/or being modulated by the stratification (Ray & Zaron, 2011). The phase and amplitude modulations of the ITs field can evolve on time scales between 5 and 20 days, which makes their predictability nearly impossible with conventional satellite altimetry (Haren et al., 2004; Nash et al., 2012). Recent studies (Nelson et al., 2019; Zaron, 2017) suggest that nonstationarity represents half of the total ITs variance on average. Wide-swath altimetry will considerably increase the SSH measurement density and open the way to predicting nonstationary ITs.

In the context of SWOT development, the BMs-ITs separation problem has been addressed with various approaches. Torres et al. (2019) make use of a spatial scale threshold above which BMs dominate and below which ITs dominate. This spectral technique is less effective when the common spatial scale interval extends too much, which is particularly the case in winter due to the emergence of small vortices (<50 km) associated with mixed layer instabilities (Ajayi et al., 2020). Gonzalez-Haro et al. (2019) and Ponte et al. (2017) explore multi-sensor approaches with altimetry and sea surface temperature observations, motivated by the fact that BMs and ITs have distinct signature on both fields.

In this paper, we propose to simultaneously and dynamically map and separate SSH components of BMs and ITs from 2D altimetric observations, distributed in time. The proposed approach, illustrated on Figure 1, implements an alternating minimization algorithm that iteratively calls two mapping techniques, each one specific to the estimation of a component (BMs or ITs). At each iteration, the observations used to map one component is

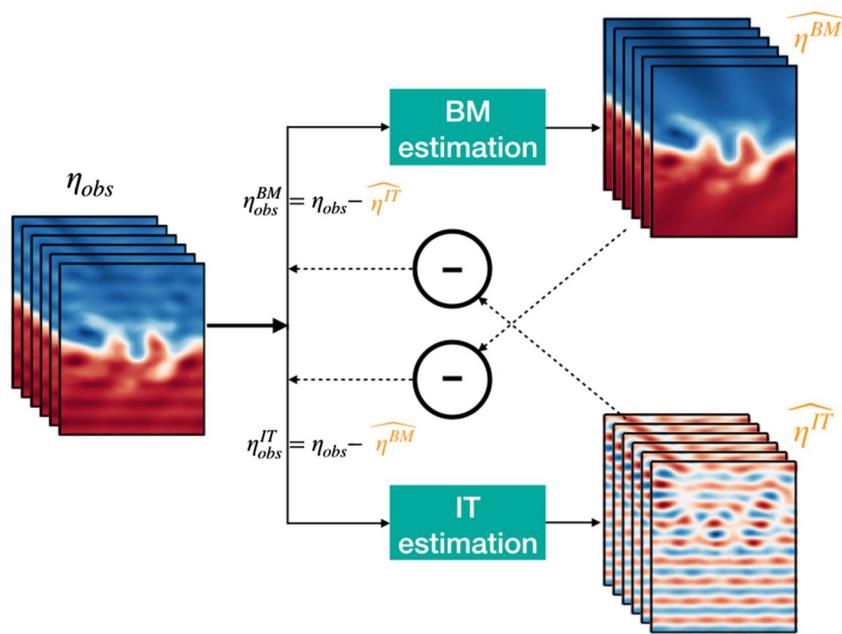


Figure 1. The joint estimation algorithm alternates balanced motions estimations and internal tides estimations with observations recursively corrected from the other component. The algorithm is formalized and described in Section 4.

made of the difference between the full observation and the previous estimation of the other component. Both mapping techniques are based on data assimilation. BMs are reconstructed with a Quasi-Geostrophic (QG) model assimilating observations with a Back-and-Forth Nudging (BFN) technique (Auroux & Blum, 2008). The algorithm is called BFN-QG hereafter. ITs are reconstructed with a Shallow-Water model (SW) assimilating observations with a 4-Dimensional Variational (4DVar) technique (Le Dimet & Talagrand, 1986). The algorithm is called 4DVar-SW hereafter. The joint estimation algorithm is tested with observing system simulation experiments (OSSE). The true state of the ocean (illustrated on Figure 2) is provided by a primitive-equation regional

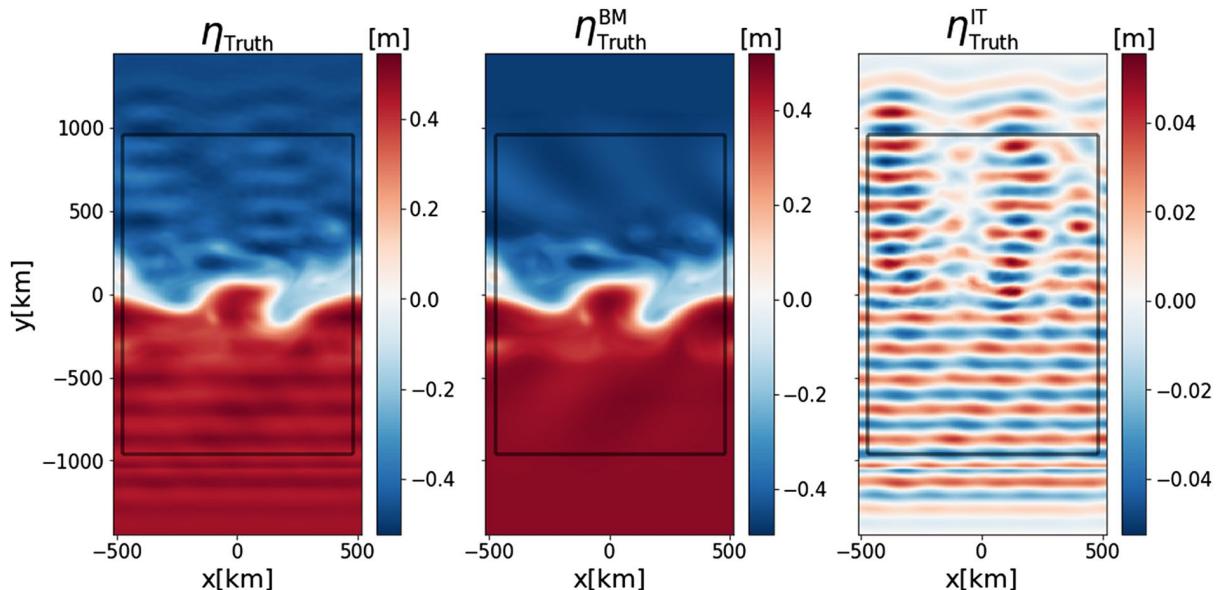


Figure 2. Sea surface height snapshot of the simulated true state of the ocean (left), its balanced motions component (middle) and its internal tides component (right). The black square represents the study domain in which the reconstructions are performed.

model, ROMS, in an idealized configuration that simulates the propagation of a mode-one ITs through a turbulent mesoscale zonal jet (Dunphy et al., 2017; Ponte et al., 2017).

The paper is structured as follows: Sections 2 and 3 present the data assimilation algorithms reconstructing BMs and ITs, respectively; Section 4 formalizes and describes the general joint estimation approach that implements both assimilation algorithms; The experimental set-up is presented in Section 5 and the results are discussed in Section 6; Conclusions and perspectives are drawn in Section 7.

2. Mapping the Balanced Motions: BFN-QG Algorithm

The mapping technique for BMs is presented in detail in Le Guillou et al. (2021). It is based on a QG model and a data assimilation method called Back and Forth Nudging (Auroux & Blum, 2008), and referred to as BFN-QG. The dynamical model is a 1.5-layer QG model (Ubelmann et al., 2015). Forcing and mixing terms are omitted, resulting in the simplified QG equations:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + J(\psi, q) = 0 \quad (1)$$

where J is the Jacobian operator and the streamfunction ψ is proportional to SSH η :

$$\psi = \frac{g}{f} \eta \quad (2)$$

with g the gravity constant, and f the Coriolis parameter. The potential vorticity (PV) is linked to the streamfunction by the elliptical equation:

$$q = \nabla^2 \psi - \frac{1}{L_R^2} \psi \quad (3)$$

where ∇^2 is the Laplace operator and L_R is the first baroclinic Rossby radius of deformation. Equation 1 needs boundary conditions (in practice, a prescribed SSH field is set at the border pixels; see Section 5 for more details). Propagating SSH from time t_i to time t_{i+1} is a succession of elementary steps: (a) compute q_i from η_i with Equations 2 and 3, (b) propagate q_i with Equation 1 to obtain q_{i+1} , (c) invert Equation 3 to retrieve ψ_{i+1} , then η_{i+1} .

The BFN technique is based on the Nudging method (Anthes, 1974), which consists of adding an extra term to the model prognostic equation (Equation 1) to pull the model variable towards the observations. This term is proportional to the difference between the observations and the model variable. Here, the model variable is PV q and the observations are 2D SSH η_{obs} . Thanks to Equations 2 and 3, a corresponding PV observation q_{obs} can be derived from η_{obs} and used to nudge Equation 1 as:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + J(\psi, q) - K(q_{\text{obs}} - q) = 0 \quad (4)$$

where K is a tunable coefficient controlling the strength of nudging. As explained in Le Guillou et al. (2021), the nudging term $K(q_{\text{obs}} - q)$ must exhibit smooth variations in time to avoid the emergence of numerical instabilities and enhance the constraint of the observations on the model dynamics. A Gaussian kernel is used for the nudging term:

$$K(q_{\text{obs}} - q)[t] = \sum_{t_{\text{obs}}} K_0 e^{-\left(\frac{t-t_{\text{obs}}}{\tau}\right)^2} (q_{\text{obs}}[t_{\text{obs}}] - q[t]) \quad (5)$$

where K_0 and τ are the nudging parameters and t_{obs} are the observation times. Note that, similarly, spatial smoothing needs to be implemented in the case of irregular space distribution of observations, as discussed in Le Guillou et al. (2021).

Nudging is also performed backward in time, by adding a feedback term with a sign opposite to that of the forward nudging. Note that the backward integration of the model is possible because the model Equation 1 is reversible in time.

The BFN is the combination of the forward nudging and the backward nudging over a sliding time window of length T_{BFN} . Over a specific time window $[t_i, t_i + T_{\text{BFN}}]$, the algorithm works as follows. The model state at time t_i is prescribed from the previous time window. The forward nudging is first computed from t_i to $t_i + T_{\text{BFN}}$. The final state at $t_i + T_{\text{BFN}}$ is then used as initial condition to run the backward nudging back to t_i . The result initializes the forward nudging, and so on until convergence. In a few iterations, the model converges towards a trajectory that both fits the observations and complies with the QG dynamics. The process can then be carried out in the next time window. Note that the time window T_{BFN} must be long enough to include multiple observations and short enough to preserve dynamical consistency and ensure convergence within the window. The implementation details specific to the problem addressed in the paper are given in Section 5.

3. Mapping the Internal Tide Signal: 4Dvar-SW Algorithm

In this section, we aim at estimating the surface signature of ITs excited by one tidal component of frequency ω .

3.1. Dynamical Model

The dynamical model used to simulate the surface propagation of ITs motions is a linear SW model. This model represents the first baroclinic mode dynamics assumed to capture the largest part of the ITs signal (Ray & Zaron, 2016). The equations are (Gill, 1982):

$$\frac{\partial u}{\partial t} - fv = -g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (6a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + fu = -g \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (6b)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -H_e \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (6c)$$

where (u, v) are the velocity components, η is the SSH, f is the Coriolis frequency, and H_e the equivalent depth that determines the baroclinic deformation radius (through the relation $R_d = \sqrt{g H_e / f}$). Equation 6 are discretized on a C-grid and a leap-frog time-stepping scheme (Sadourny, 1975). The domain is a square, land-free domain with a flat bottom and open boundaries. ITs enter through the boundaries and are not generated within the domain.

After entering the domain, ITs can be made incoherent by time variations of the equivalent depth, since H_e modulates the phase speed of the waves, given by $u_{\text{phase}} = \sqrt{\frac{f^2}{k^2} + (g H_e)^2}$ where k is the wavenumber. Space variations of H_e (along with the spatial variation of f) changes the wave propagation direction and its wavelength (Rainville & Pinkel, 2006).

Open Boundary Conditions (OBCs) are designed to introduce and let out waves. They are of the radiative type (Blayo & Debreu, 2005). The amplitudes and directions of incoming waves are prescribed with a Flather condition (Flather, 1987) as:

$$v^n \pm \sqrt{\frac{g}{H_e}} \eta = v_{\text{ext}}^n \pm \sqrt{\frac{g}{H_e}} \eta_{\text{ext}} \quad (7)$$

where v^n is the normal component of the wave velocity at the boundary. Parameters v_{ext}^n and η_{ext} must be prescribed. The signs in the above equation vary with the boundary (− for southern and western boundaries, + for the others).

Incoming waves are superpositions of progressive monochromatic waves with frequency ω and absolute wavenumber k . The frequency is a tidal frequency (details are given in Section 5) and k is deduced from ω using the dispersion relation:

$$\omega^2 = g H_e k^2 + f^2 \quad (8)$$

The superposing, monochromatic waves differ by their amplitudes and their propagation directions. Denoting v_θ^n and η_θ the amplitudes of velocity and SSH of the wave entering the domain with an angle θ with the inward

boundary normal direction, and denoting κ_θ the unit vector of the propagation direction, the expressions of parameters v_{ext}^n and η_{ext} at boundary grid point $\mathbf{r} = (x, y)$ and time t are:

$$\eta_{ext}[t, x, y] = \sum_{\theta} \Re e \left(\underline{\eta}_{\theta}[t, x, y] e^{i(\omega t - k \kappa_{\theta} \cdot \mathbf{r})} \right), \quad (9a)$$

$$v_{ext}^n[t, x, y] = \sum_{\theta} \Re e \left(\underline{v}_{\theta}^n[t, x, y] e^{i(\omega t - k \kappa_{\theta} \cdot \mathbf{r})} \right) \quad (9b)$$

where i is the imaginary unit and $\underline{\cdot}$ is the complex notation.

Parameters v_{θ}^n and $\underline{\eta}_{\theta}$ are linked together by the polarisation relations (obtained from Equation 6). Thus, prescribing boundary conditions with Equation 7 implies setting only $\underline{\eta}_{\theta}$ at each boundary and for each angle θ . A limited number of angles are predefined. The prescription of the boundary conditions involves $2N_{\theta}N_bN_t$ values, with N_{θ} the number of prescribed wave directions, N_b the number of grid points at the boundary, and N_t the number of model time steps. In the following, we denote all these external values to be prescribed by η_{ext} .

3.2. 4DVar Cost Function

The forward problem described in Section 3.1 is here formulated as:

$$(u, v, \eta)_{t,x,y} = M(\phi) \quad (10)$$

where $\phi = (H_e, \eta_{ext})_{t,x,y}$ are the input parameters, M is the non linear operator solving the prognostic Equation 6 associated with the OBCs (Equation 7) over a fixed time interval $[t_0, t_1]$. In Equation 10, we neglect the initial condition in the function arguments. Given the high speed of the waves crossing the domain and the absence of balanced motions, the initial condition is completely forgotten after 10 days. As stated in Section 5, the 4DVar window is 4-month long, and the first (and last) 10 days are ignored for the performance diagnostics. The sea state essentially depends on boundary conditions η_{ext} and model parameter H_e . So, the initial condition is unimportant. In the following, we start experiments with a flat and motionless body of water (all variables to zero).

The associated inverse problem consists in seeking the set of parameters $\phi^{\text{opt}} = (H_e^{\text{opt}}, \eta_{ext}^{\text{opt}})$ that produces a model state trajectory that best fits the observations η_{obs} in the time window $[t_0, t_1]$. We formulate this problem as the minimization of the 4DVar cost function:

$$J(\phi) = (\phi - \phi^b)^T B^{-1} (\phi - \phi^b) + (\eta_{\text{obs}} - H \cdot M(\phi))^T R^{-1} (\eta_{\text{obs}} - H \cdot M(\phi)) \quad (11)$$

where $\phi^b = (H_e^b, \eta_{ext}^b)$ is the background control vector, H is the linear operator that projects the model state in the observation space, B and R denote the background and observation error covariance matrices, respectively. In this work, these matrices are set diagonal. This aspect is justified by the expression of the control variables in a reduced-order basis, making them independent from each other (see Section 3.3).

The minimum of J is found using a descent method that requires the calculation of the gradient ∇J with respect to ϕ :

$$\nabla J(\phi) = 2B^{-1}(\phi - \phi^b) - 2M^* \cdot H^T \cdot R^{-1}(\eta_{\text{obs}} - H \cdot M(\phi)) \quad (12)$$

This gradient is computed with an adjoint method that makes use of the adjoint model M^* . Since the model M is non linear, an incremental 4Dvar algorithm (Courtier et al., 1994) is implemented to find the optimal set of parameters ϕ^{opt} that cancels ∇J .

3.3. Reduced-Order 4Dvar

Order reduction is a standard practice in geophysical data assimilation or inversion, to overcome the issues of ill-posedness and numerical complexity (e.g., Robert et al., 2005, for 4Dvar). Control variables are projected into a low-dimensional basis of vectors (EOFs - Empirical Orthogonal Functions—are a usual choice, relevant to many inverse problems) and the cost function minimization is performed in this low-dimensional space to make it possible or faster.

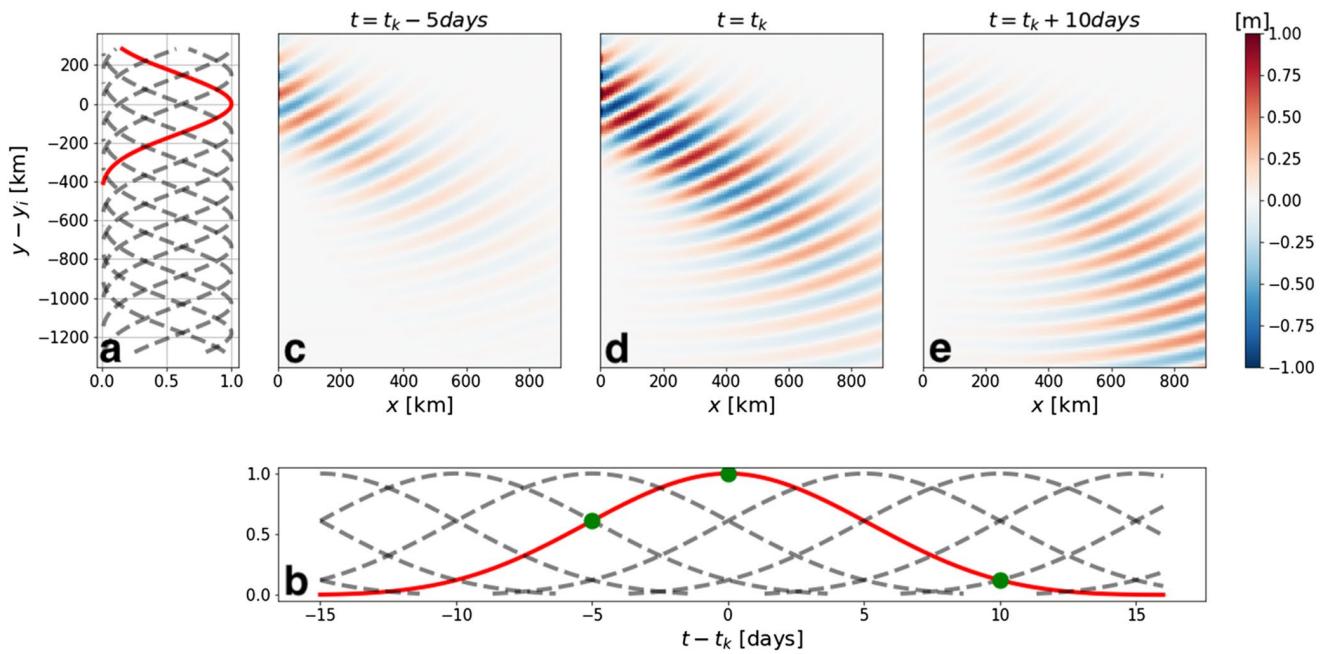


Figure 3. Illustration of the reduced-order basis for η_{ext} at the western border for $\theta = -\pi/4$: (a) the spatial decomposition with $\sigma = 150$ km (in red the spatial Gaussian centered around y_i); (b) the temporal decomposition with $\tau = 5$ days (in red the temporal Gaussian centered around t_k); (c, d, e) sea surface height snapshots produced by one element $G^{(k,i)}$ of the basis around the space-time coordinate (y_i, t_k) at three distinct times (represented by the green circles in (b)).

In this work, we propose to express the control vector (i.e., the model parameters ϕ) in a reduced basis G made of space-time Gaussian functions. This choice has been motivated by the fact that we know H_e and η_{ext} should vary “weakly” in space and time. Depth H_e inherits its time variation scales from the balanced flow, and the tidal forcing is quasi-stationary in comparison with the generated internal tides. Mathematically, we call $G^{(k,i)}$ one basis function centered at the point (t_k, r_i) (t_k is a timestamp and r_i is a spatial coordinate), expressed as:

$$G^{(k,i)}(t, r) = e^{-\left(\frac{(t-t_k)^2}{2\tau^2}\right)} e^{-\left(\frac{\|r-r_i\|^2}{2\sigma^2}\right)} \quad (13)$$

where τ (respectively σ) is the time (respectively space) characteristic scale. For H_e , r and r_i both refer to 2D coordinates (x, y) while for η_{ext} they refer to a 1D coordinate (along the domain boundary). Thus, $G^{(k,i)}$ is a 3D function for H_e and a 2D function for η_{ext} . As an illustration, we represent in Figure 3 the space-time distribution of the basis functions for η_{ext} at the western boundary and the wavy SSH produced by one element of the basis. Two successive basis functions are separated by $t_{k+1} - t_k = \tau$ in time and $\|r_{i+1} - r_i\| = \sigma$ in space.

In this basis, ϕ is written as:

$$\phi = G \cdot w = \sum_k \sum_i w_{ki} G^{(k,i)} \quad (14)$$

where $w = (w_{ik})$ are the coordinates of ϕ in the basis G , and the new control variables of the 4DVar. The cost function J and its gradient ∇J are then obtained by replacing H by $H \cdot G$ in Equations 11 and 12.

For the order reduction to be efficient, the characteristic scales τ and σ of the Gaussian basis functions have to be carefully chosen. They should be short enough to explain a maximum of the variability of H_e and η_{ext} and long enough to reduce significantly the dimension of the control space. Besides, the use of the order reduction (in addition to the motionless initial state) prevents non tidal dynamics (such as geostrophic motions) from appearing. This also impacts the choice of the characteristic scales: τ (respectively σ) must be larger than the tidal time period (respectively wavelength). Table 2 gives the retained (constant) values of τ and σ for the experiments presented in Section 5, considering the previous comments. With these values, the dimension of the control space is reduced by a factor of 10^4 .

Algorithm 1. The joint estimation algorithm. Variables $\widehat{\eta}^{\text{BM}}$ and $\widehat{\eta}^{\text{IT}}$ are BMs and ITs estimations, respectively. C is a convergence criterion. In this study, we stop the algorithm when the space-time trajectories of BMs and ITs do not differ more than 1% of those obtained at the previous iteration.

```

Result:  $\widehat{\eta}^{\text{BM}}$  and  $\widehat{\eta}^{\text{IT}}$ 
Initialize  $\eta_{\text{obs}}^{\text{BM}} = \eta_{\text{obs}}$ ;
 $K = \text{True}$ ;
while  $C$  do
    1. Compute  $\widehat{\eta}^{\text{BM}}$  from  $\eta_{\text{obs}}^{\text{BM}}$  solving 16a ;
    2. Do  $\eta_{\text{obs}}^{\text{IT}} = \eta_{\text{obs}} - \widehat{\eta}^{\text{BM}}$  ;
    3. Compute  $\widehat{\eta}^{\text{IT}}$  from  $\eta_{\text{obs}}^{\text{IT}}$  solving 16b ;
    4. Do  $\eta_{\text{obs}}^{\text{BM}} = \eta_{\text{obs}} - \widehat{\eta}^{\text{IT}}$  ;
    5. Update  $C$ 
end

```

In addition to reducing the size of the control vector, the reduced order basis justifies the choice of a diagonal matrix for B , assuming that the basis element are independent from each other.

4. Joint Estimation Approach

As stated in the introduction, our goal is to map and separate BMs and ITs based on wide-swath altimetry observations that contains both components, and our approach is based on data assimilation. Let us represent by η^{BM} the SSH field related to BMs, η^{IT} the SSH field related to ITs, and η_{obs} the observation of $\eta^{\text{BM}} + \eta^{\text{IT}}$. The reconstruction problem is formulated as finding:

$$\arg \min_{\eta^{\text{BM}}, \eta^{\text{IT}}} \|\eta^{\text{BM}} + \eta^{\text{IT}} - \eta_{\text{obs}}\|^2 \quad (15)$$

where the norm typically considered here is the L_2 norm based on the space-time integral. The resolution of the minimization problem is addressed using a classical alternating minimization procedure (Tseng, 1990). The use of an alternating minimization algorithm is based on the strong assumption of the decoupling between the dynamics driving BMs and ITs. Iterations are performed, alternating the two minimization subproblems:

$$\widehat{\eta}_k^{\text{BM}} = \arg \min_{\eta^{\text{BM}}} \left\| \eta^{\text{BM}} + \widehat{\eta}_{k-1}^{\text{IT}} - \eta_{\text{obs}} \right\|^2, \quad (16a)$$

$$\widehat{\eta}_k^{\text{IT}} = \arg \min_{\eta^{\text{IT}}} \left\| \widehat{\eta}_k^{\text{BM}} + \eta^{\text{IT}} - \eta_{\text{obs}} \right\|^2 \quad (16b)$$

In these equations, k is an iteration index. $\widehat{\eta}_k^{\text{BM}}$ and $\widehat{\eta}_k^{\text{IT}}$ are BMs and ITs estimations, respectively, at iteration k .

Both minimization subproblems in Equations 16a and 16b can be solved with methods standard in geophysical data assimilation (4DVar, 3DVar, Kalman filters, etc). In what follows, Equation 16a is solved with BFN-QG (see Section 2) assimilating the corrected observation $\eta_{\text{obs}} - \widehat{\eta}_{k-1}^{\text{IT}}$. Equation 16b is solved with 4DVar-SW (see Section 3) assimilating the corrected observation $\eta_{\text{obs}} - \widehat{\eta}_k^{\text{BM}}$. The joint estimation pseudo-code is presented in Algorithm 1 and illustrated in Figure 1.

With this setup, BMs and ITs dynamics are uncoupled (which is essential for the alternating assimilation to work): they are governed by distinct prognostic equations and no link is made between them (in particular, H_e and L_R are treated as independent quantities). In reality, BMs and ITs interact together. Here, we only simulate the effect of BMs on ITs propagation through the control of the space-time variation of H_e .

5. Experiment Setup

The joint estimation algorithm is tested with OSSEs: a simulation provides reference surface data containing both BMs and ITs motions; SSH observations are extracted from this simulation and are assimilated; the estimated fields are then compared to the reference fields.

5.1. Reference Simulation

The test flow consists of a turbulent zonal jet and a mode-1 internal tide propagating signal described in Dunphy et al. (2017) and Ponte et al. (2017). This simulation is carried out with the Coastal and Regional Ocean CCommunity (CROCO, <https://www.croc-ocean.org>) model. The horizontal resolution is 4 km and the domain size is 1,024 km × 2,880 km. The mode-one internal tide is generated by a zonally uniform tide excitation in the southern part of the domain. The time period of the tide is $T = 12$ hr. The plane wave produced is propagating northward and is encountering the meridional jet located at the center of the domain (Figure 2).

The reference SSH, called η_{truth} , is decomposed into BMs and ITs (Dunphy et al., 2017). The reference BMs field $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ is obtained by low pass filtering η_{truth} :

$$\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}(t) = \frac{1}{W} \int_{t-2T}^{t+2T} \eta_{\text{truth}}(t_i) e^{-\left(\frac{t-t_i}{T}\right)^2} dt_i$$

where $W = \int_{t-2T}^{t+2T} e^{-\left(\frac{t-t_i}{T}\right)^2} dt_i$. The reference ITs field $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$, is obtained with an harmonic fitting:

$$\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}(t) = a_c(t) \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) + a_s(t) \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$$

where:

$$a_c(t) = \frac{2}{W} \int_{t-2T}^{t+2T} \eta_{\text{truth}}(t_i) \cos\left(\frac{2\pi t_i}{T}\right) e^{-\left(\frac{t-t_i}{T}\right)^2} dt_i$$

$$a_s(t) = \frac{2}{W} \int_{t-2T}^{t+2T} \eta_{\text{truth}}(t_i) \sin\left(\frac{2\pi t_i}{T}\right) e^{-\left(\frac{t-t_i}{T}\right)^2} dt_i$$

Figure 2 shows snapshots of the total field, BMs, and ITs flows. The ITs surface signature on SSH is not exceeding 5 cm, while BMs' is around 50 cm. These values are consistent with observed SSH in western boundary current for the BMs (McWilliams et al., 2019) and high energetic internal tide activity (Zaron & Egbert, 2014) for the ITs. The ITs wavelength is about 150 km. South of the jet, the wave is rectilinear and aligned with the southern boundary, which reflects its stationarity. North of the jet, the wave is dispersed due to its interaction with turbulent BMs, producing nonstationarity in the wavefield (Dunphy et al., 2017). The (weak) residual of this decomposition ($|\eta_{\text{truth}} - \eta_{\text{truth}}^{\text{BM}} - \eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}| < 1$ cm, not shown) corresponds mostly to the mode 2 ITs generated by the interaction of the wavefield with the turbulent jet.

In the following experiments, the horizontal resolution is degraded to 16 km (by local averaging) to reduce computational complexity. Observations are extracted from the degraded fields. Both models (QG/SW) and diagnostics are computed on this coarse grid.

5.2. Observational Scenarios

Observations are drawn from the true (degraded) SSH (η_{truth}), containing both BMs and ITs components. They are free of error, complete in space, and regularly distributed in time. The observation frequency is 75 hr in the reference experiments discussed in Section 6.1.

In order to help evaluation of the mapping performance of the joint estimation experiments (hereafter denoted as *joint*), two additional scenarios are considered. The first one, denoted *idealized*, refers to the case where both components can be observed separately, and each observation is processed with the appropriate assimilation system. This means that BFN-QG (4Dvar-SW) is fed with observations extracted from $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ ($\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$, respectively) fields. This ideal scenario provides upper bounds for the mapping performance of the *joint* experiments. The second scenario, hereafter denoted as *independent*, implements each assimilation system independently (without iteration) with observations of the full signal η_{obs} . This scenario provides a baseline to be outperformed by the *joint* experiments.

This study also investigates the impact of the observational temporal sampling on the mapping performances. For that purpose, a sensitivity experiment is performed and discussed in Section 6.2.

Table 1
BFN-QG Parameters

Parameter	Description	Value
dt	QG model timestep	1,800 s
L_R	First Rossby radius of deformation	30 km
$K_0 dt$	(non-dimensionalized) Nudging coefficient	0.1
τ	Nudging time scale	2 days
T_{BFN}	BFN sliding time window length	15 days

5.3. Configuration of Assimilation

Assimilation is performed in an inner domain of the reference simulation, illustrated by the black squares in Figure 2, to avoid the effects of boundary conditions and forcing in the reference simulation. The experiments are run over 4 months.

The BFN-QG parameters are listed in Table 1. The Rossby radius of deformation L_R is chosen from a climatology for western boundary currents. Note that L_R is fixed, while H_e is a space-time varying control variable of the 4DVar-SW system. The boundary conditions for the QG model were given by the mean SSH field, which is computed by time averaging the reference SSH η_{truth} over the entire simulation time period. For operational implementation, DUACS

L4 product (or equivalent) could be used, as in Le Guillou et al. (2021). The length of the BFN time window T_{BFN} is fixed to 15 days after a few trial and error experiments. After BFN convergence (reached when the forward and backward trajectories do not differ from the previous ones by more than 1%), the 7 days in the middle of the interval (days 5–11) are saved and the BFN windows is shifted by 3.5 days for the next iterations. Results from days shared by two consecutive windows are averaged. This guarantees smoothness in the time sequence of SSH.

The 4Dvar-SW parameters are listed in Table 2. For the *joint* scenario, the background values H_e^b and η_{ext}^b are updated at each iteration by the optimal values found at the previous iteration. We consider two values for the observation error covariance matrix R : 0.01 m for the *joint* and *idealized* scenarios, 0.1 m for the *independent* scenario. The value for the *independent* scenario is higher to reflect representativeness errors and allow convergence of the 4Dvar-SW even with the presence of BMs in the observations. We set $B_{\eta_{\text{ext}}}$ one order of magnitude below the amplitude of the target signal because of the superposition of the Gaussian basis functions in space (as illustrated in panel b of Figure 3).

5.4. Diagnostics

For measuring the performance of the reconstruction, we use the time varying Root Mean Square Error (RMSE) and its associated score S , defined as follows:

$$RMSE^{\text{BM}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left((\widehat{\eta}^{\text{BM}}(t, i) - \eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}(t, i))^2 \right)}, \quad (17a)$$

$$S^{\text{BM}} = 1 - \frac{\overline{RMSE^{\text{BM}}}}{RMS(\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}} - \overline{\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}})}, \quad (17b)$$

$$RMSE^{\text{IT}}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left((\widehat{\eta}^{\text{IT}}(t, i) - \eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}(t, i))^2 \right)}, \quad (17c)$$

$$S^{\text{IT}} = 1 - \frac{\overline{RMSE^{\text{IT}}}}{RMS(\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}})} \quad (17d)$$

where N is the number of pixel in the study domain, \bar{X} is the time-average of the variable X and RMS is the root mean square function. A score of 1 indicates a perfect reconstruction in terms of RMSE, while a score of 0 indicates that the time-averaged RMSE is as large as the RMS of the reference field. Note that for BMs, the score is defined relative to the time anomaly of the reference field.

6. Results

6.1. Reconstruction Performances

Figure 4 illustrates the performances of the joint estimation algorithm over the iterations for a temporal sampling of 75 hr (6.25 ITs periods). The joint estimation algorithm converges after 10 iterations. The scores obtained with the *idealized* and *independent* scenarios are also shown. As the joint estimation is started by a BMs reconstruction, the first iteration of the joint algorithm corresponds to the *independent* scenario for BMs.

Table 2
4Dvar-SW Parameters

Parameter	Description	Value
dt	SW model timestep	1,200 s
θ	Entry angles of incoming waves	$-\pi/2, 0, \pi/2$
σ	Gaussian space scale	150 km
τ	Gaussian time scale	20 days
H_e^b	Background value for H_e	0.9 m
η_{ext}^b	Background value for η_{ext}	0 m
B_{H_e}	Background error for H_e	0.2 m
$B_{\eta_{ext}}$	Background error for η_{ext}	0.001 m
R	Observational error	0.01 m or 0.1 m

Note. As the covariance matrix (B and R) are diagonal, only standard deviations are given.

Without the alternating minimization, the estimation scores for both BMs and ITs fall between 60% (worst case, *independent* scenario) and 80% (best case, *idealized* scenario). The 80% bound is likely due to the observation time sampling and to physical processes unresolved by the QG and SW models. These processes include the presence of higher baroclinic modes and ageostrophic dynamics for the QG model, higher tidal harmonics and neglected terms in the SW model. The lower 60% bound reflects the presence of the component that the system cannot (or hardly) reconstruct (ITs for the QG model, BMs for the SW model). This component appears as noise in the observations.

The joint estimation algorithm is able to disentangle BMs and ITs components of SSH. Throughout iterations, both components are progressively separated. This is particularly visible in the $\hat{\eta}^{BM}$ snapshots, where ITs signature is clearly visible at the first iteration, and gradually filtered out throughout iterations. We attribute the strength of the joint estimation to the fact that each data assimilation sub-system (BFN-QG and 4DVar-SW) filters out the component it is not supposed to reconstruct. This is reflected in the relatively high (closer to 1 than 0) scores reached in the *independent* scenarios.

The 4Dvar-SW technique can reconstruct a large part of the nonstationary part of ITs. Figure 5 shows snapshots of the stationary and nonstationary parts of the reference and estimated ITs fields. Stationary part has been extracted with an harmonic fitting of the signal over all the experimental window. Nonstationary part is obtained by subtracting the stationary part from the full ITs field. Eight seven percent of the stationary and 44% of the nonstationary ITs variances are recovered on average. For the nonstationary ITs fields, 4Dvar-SW captures 54% of the variance in the northern part of the domain, but only 28% in the southern part. This poor performance is attributed to the weakness of the nonstationary signal in the southern part (Figure 5, right column). Besides, some physical processes, such as ITs reflection on the turbulent jet, refraction by relative vorticity gradients and vertical shear (Dunphy et al., 2017; Olbers, 1981) may not be captured by 4Dvar-SW.

The spatial patterns of SSH $\hat{\eta}^{BM}$ estimated by BFN-QG and the optimal equivalent depth H_e^{opt} obtained with 4Dvar-SW share similarities together and with the reference equivalent depth, as illustrated on Figure 6. A natural improvement of the method would be to use $\hat{\eta}^{BM}$ to estimate a background value H_e^b in the 4Dvar-SW to improve the ITs reconstruction. This would require to exploit the fact that H_e reflects the “large scale” baroclinic radius (L_R) modified by the mesoscale eddies through modification of the stratification profile $N(z)$ (Dunphy et al., 2017; Kelly & Lermusiaux, 2016). However, to do so, one would need a climatology of the stratification and, more critically, a knowledge of the vertical structure of the balanced flow, in order to convert SSH anomalies to H_e . Reciprocally, 4DVar-SW could help refine the estimation of H_e and stratification, thus providing some information on the vertical structure of the balanced currents and on the ocean heat content (Zhao, 2016).

6.2. Sensitivity to the Observation Temporal Sampling

In this section we investigate the impact of the observation temporal sampling on the estimation of ITs and BMs. Thirteen time intervals Δt_{obs} are tested, from 69 to 75 hr by increments of 30 min. The ITs period being $T = 12$ hr, the 6 hr-interval length corresponds to $T/2$ and the central 72 hr step corresponds to a multiple of T . For each Δt_{obs} , we run an *idealized*, an *independent* and an *joint* experiments. The results are shown on Figure 7.

The ITs estimation is strongly degraded near $\Delta t_{\text{obs}} = 72$ hr, which affects the reconstruction of BMs in the joint estimation. At $\Delta t_{\text{obs}} = 72$ hr, ITs estimation scores are even negative in the *joint* and *independent* scenarios. This particular time interval presents a singularity and leads to an aliasing issue, since it observes only one phase of the wavefield and does not detect the wave propagation. The same occurs with multiples of $T/2$ (e.g., 66 and 78 hr, not shown here), when only two opposite phases of the wavefield are observed. Since the ITs component is not filtered out by 4DVar-SW, the estimation of BMs by BFN-QG in the *joint* scenario is similar to the *independent* one.

Using the joint estimation algorithm mitigates the poor ITs reconstruction with time intervals near 72 hr. The ITs estimation scores with $\Delta t_{\text{obs}} = 71$ hr or 73 hr are negative in the *independent* experiments, but exceed 0.6 in the *joint* experiments. This experiment suggests that specific temporal samplings of wide-swath altimeters (e.g., that

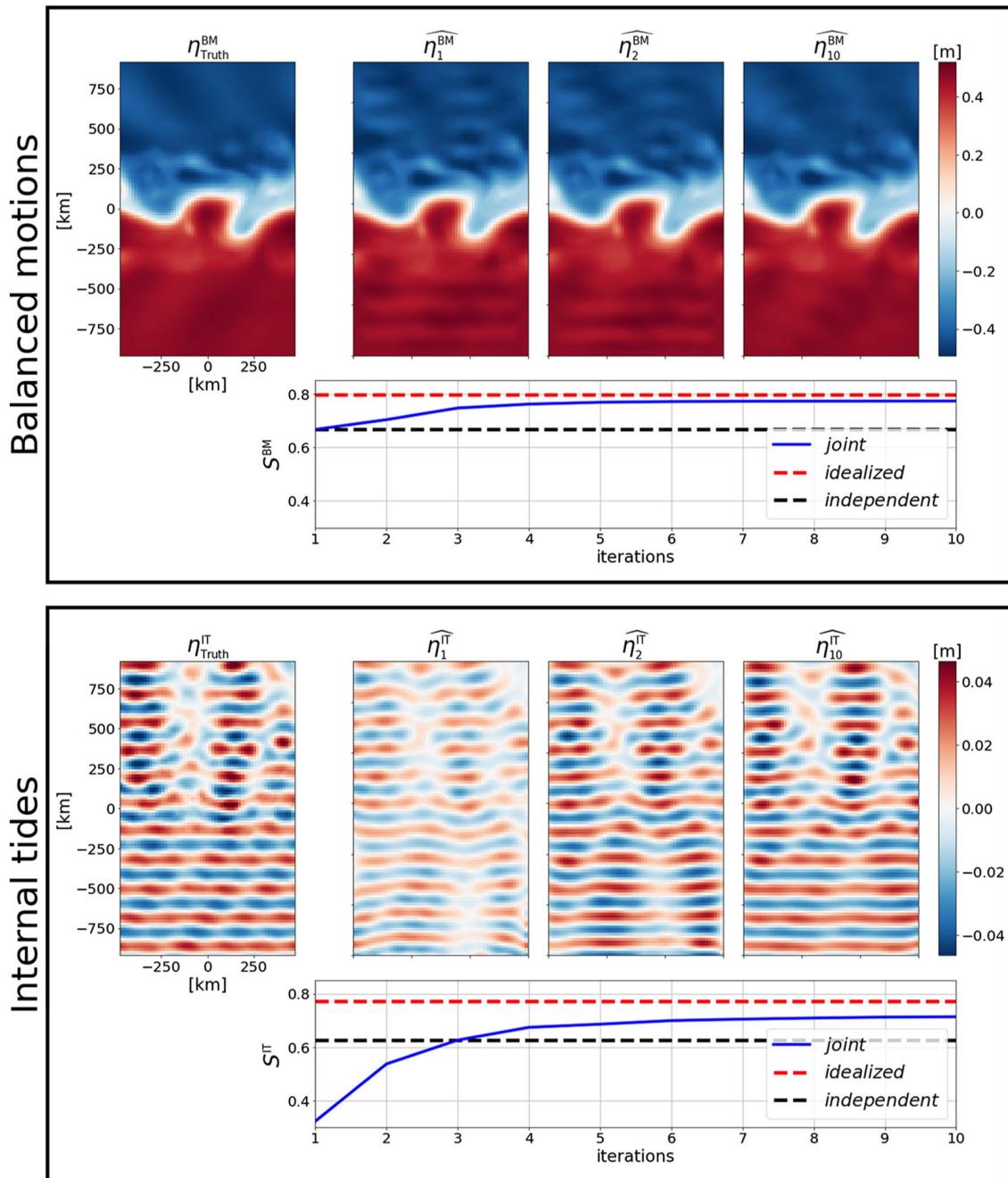


Figure 4. Performances of the estimation of balanced motions (top) and internal tides (bottom). For each class of motion, snapshots at the first, the second, and the tenth iterations are shown. The evolution of the scores for the *joint* (solid blue curve), *idealized* (dash red curve) and *independent* (dash black curve) scenarios are plotted in function of the iterations of the joint estimation algorithm.

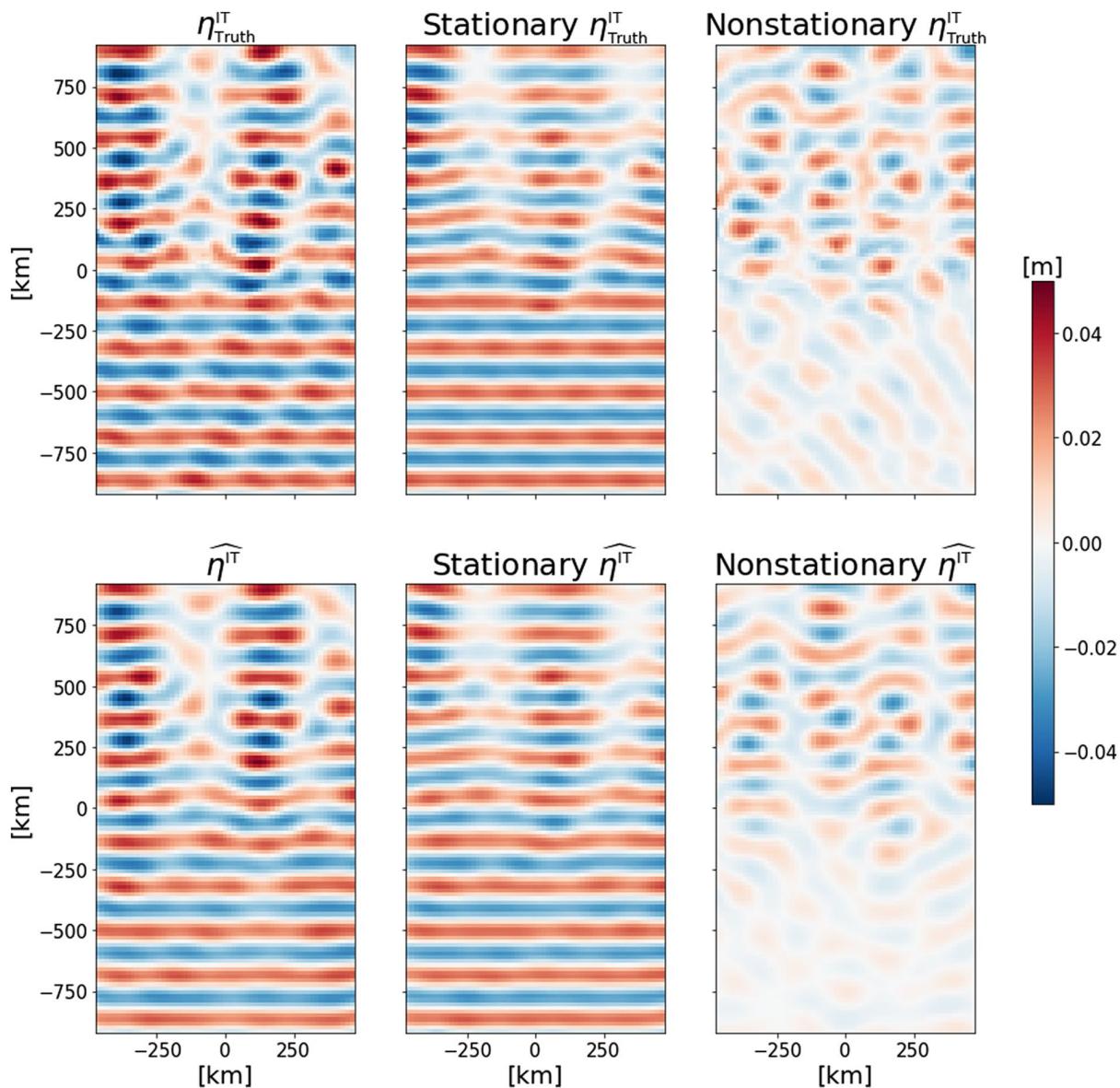


Figure 5. Sea surface height snapshots of the internal tides (ITs) field from the reference (top) and the reconstruction by the joint estimation algorithm (bottom). The full ITs signal (left) is decomposed in the stationary (middle) and nonstationary (right) components.

of SWOT) will be key to a good BMs/ITs separation, and that the joint estimation algorithm can mitigate (but not rule out) the bad consequences of an inappropriate temporal sampling.

7. Conclusions

In this study, we have presented an alternating minimization algorithm to simultaneously and dynamically map and separate ITs and BMs signals from 2D altimetric observations. Two data assimilation techniques are used in an iterative process to estimate both signals: BMs are reconstructed by the BFN-QG algorithm while ITs are reconstructed by the 4Dvar-SW algorithm. At any given iteration, the assimilated observations used to map one signal are made of the difference between the full observation (containing both signals) and the previous estimation of the other signal. The use of the 4Dvar-SW algorithm for ITs reconstruction allows to map (i.e., estimate in magnitude and phase) both stationary and nonstationary ITs signals which is not obvious with other conventional separation methods such as harmonic analyses.

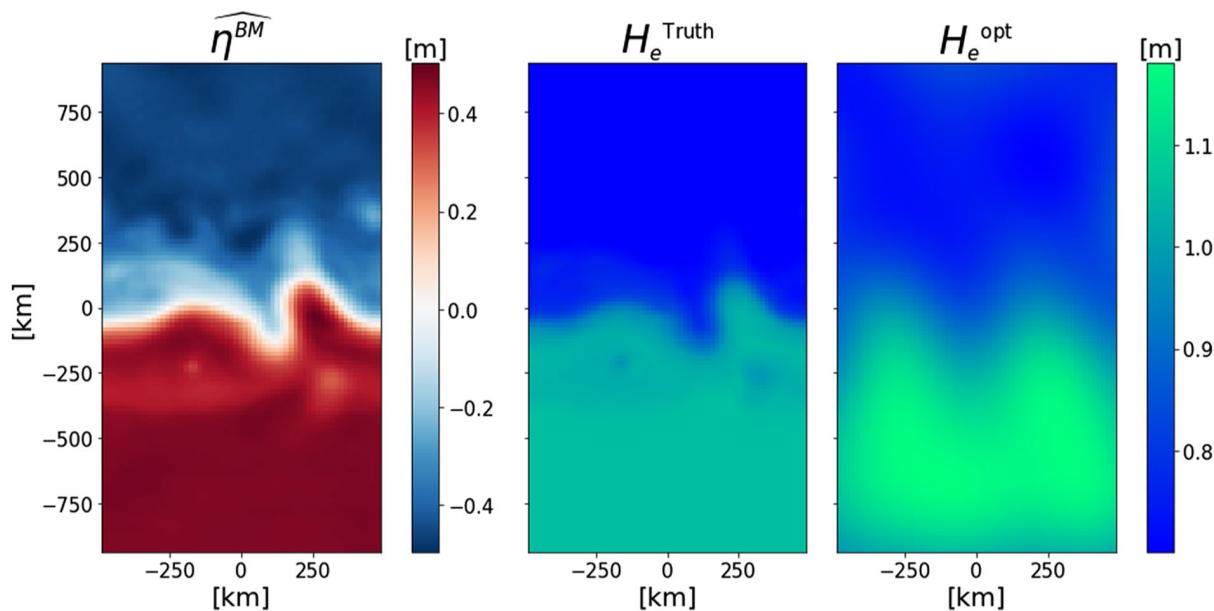


Figure 6. Left: balanced motions sea surface height reconstructed by BFN-QG in the joint estimation algorithm. Middle: reference H_e computed from the 3D fields of the reference simulation. Right: H_e estimated by 4Dvar-SW in the joint estimation algorithm.

The joint estimation of BMs and ITs has been tested in an idealized context, with a true state of the ocean and artificial observations extracted from a numerical simulation that propagates a mode-one internal tide through a turbulent quasigeostrophic jet. This numerical experiment aims at illustrating the feasibility of this approach in a simplified context and should constitute a step closer to the processing of wide-swath altimetry data.

The results show that the joint estimation allows to simultaneously separate and estimate 78% and 75% of the BMs and ITs variance, respectively. The remaining variance is interpreted as being due to non resolved dynamics by the QG and SW models.

A sensitivity study of the observational temporal sampling has also been performed and shows that an unfortunate temporal sampling of the observations can be detrimental to the joint estimation performances. In particular, the performances of the ITs reconstruction are considerably reduced when the time step between two consecutive observations is a multiple of half the ITs time period $T/2$. Fortunately, it turns out that this situation is singular for non sun-synchronous orbits, meaning that a slight shift from a multiple of $T/2$ in the observation time sampling ensures good performances again.

Although the results of the observational temporal sampling sensitivity study are encouraging, future work should investigate the method applied to a realistic observational sampling, such as SWOT. One of the major next steps will be to assess the potential of the method with spatially sparse observations. An interesting avenue to improve the method in that context could be to use additional information, such as conventional nadir data, to ensure the joint estimation method convergence hence improving the reconstructions.

Another crucial step towards operational SSH mapping will be to experiment on a more realistic ocean simulation, with multiple tidal components and harmonics in constant interaction. To allow the 4Dvar-SW to efficiently extract ITs signal from realistic SSH data, some technical improvement may be needed. Source terms, that generate ITs signal inside the study domain, may have to be implemented and controlled by the assimilation to map ITs signals around generation sites (located at ocean ridge and sea mounts for instance). One can also think of improving the resolved dynamics by including higher baroclinic modes. Finally, it may be needed to add interaction terms between BMs and ITs in the shallow water equations (as described in Kelly & Lermusiaux, 2016) to correctly estimate complex ITs field. For that last remark, one first strategy would be to estimate a background term of H_e from the reconstruction of BMs.

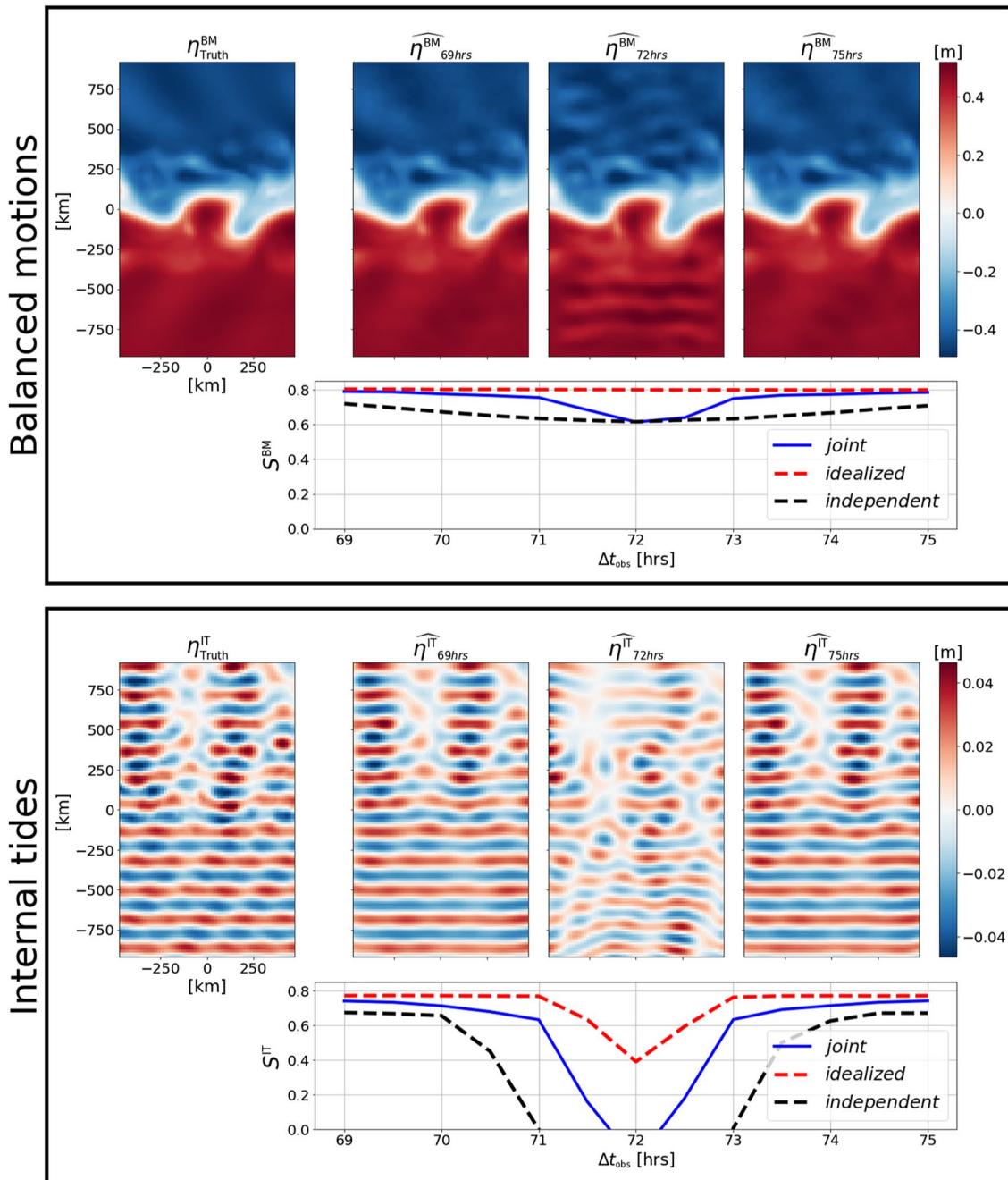


Figure 7. Performances of the joint estimation algorithm in function of the observation temporal sampling.

Data Availability Statement

Data used in this paper can be downloaded here: https://ige-meom-opendap.univ-grenoble-alpes.fr/thredds/fileServer/meomopendap/extract/LeGuillou/data_BM-IT_idealized.tar.gz. The numerical codes of the algorithms described in this paper can be found here: <https://github.com/leguillf/MASSH>.

Acknowledgments

This research was funded by ANR (project number ANR-17-CE01-0009-01) and CNES through the SWOT Science Team program. We are grateful to four anonymous reviewers for helpful comments.

References

- Ajayi, A., Le Sommer, J., Chassignet, E., Molines, J.-M., Xu, X., Albert, A., & Dewar, W. (2019). Diagnosing cross-scale kinetic energy exchanges from two submesoscale permitting ocean models. *Earth and Space Science Open Archive*, 26. <https://doi.org/10.1002/essoar.10501077.1>
- Ajayi, A., Sommer, J. L., Chassignet, E., Molines, J.-M., Xu, X., Albert, A., & Cosme, E. (2020). Spatial and temporal variability of the North Atlantic eddy field from two kilometric-resolution ocean models. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 125(5), e2019JC015827. <https://doi.org/10.1029/2019JC015827>
- Amores, A., Jordà, G., Arsouze, T., & Le Sommer, J. (2018). Up to what extent can we characterize ocean eddies using present-day gridded altimetric products? *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 123(10), 7220–7236. <https://doi.org/10.1029/2018JC014140>
- Anthes, R. (1974). Data assimilation and initialization of hurricane prediction models. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31, 701–719. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<0702:daaioh>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<0702:daaioh>2.0.co;2)
- Auroux, D., & Blum, J. (2008). A nudging-based data assimilation method: The back and forth nudging (BFN) algorithm. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 15(2), 305–319. <https://doi.org/10.5194/npg-15-305-2008>
- Ballarotta, M., Ubelmann, C., Pujol, M.-I., Taburet, G., Fournier, F., Legeais, J.-F., et al. (2019). On the resolutions of ocean altimetry maps. *Ocean Science*, 15(4), 1091–1109. <https://doi.org/10.5194/os-15-1091-2019>
- Blayo, E., & Debreu, L. (2005). Revisiting open boundary conditions from the point of view of characteristic variables. *Ocean Modelling*, 9, 231–252. <https://doi.org/10.1016/j.ocemod.2004.07.001>
- Capet, X., Roullet, G., Klein, P., & Maze, G. (2016). Intensification of upper-ocean submesoscale turbulence through charney baroclinic instability. *Journal of Physical Oceanography*, 46(11), 3365–3384. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-16-0050.1>
- Courtier, P., Thépaut, J., & Hollingsworth, A. (1994). A strategy for operational implementation of 4d-var, using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120, 1367–1387. <https://doi.org/10.1002/qj.49712051912>
- Dunphy, M., Ponte, A., Klein, P., & Gentil, S. (2017). Low-mode internal tide propagation in a turbulent eddy field. *Journal of Physical Oceanography*, 47, 649–665. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-16-0099.1>
- Flather, R. (1987). A tidal model of the northeast pacific. *Atmosphere-Ocean*, 25(1), 22–45. <https://doi.org/10.1080/07055900.1987.9649262>
- Fu, L.-L., & Ubelmann, C. (2014). On the transition from profile altimeter to swath altimeter for observing global ocean surface topography. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 31(2), 560–568. <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-13-00109.1>
- Garrett, C., & Kunze, E. (2007). Internal tide generation in the deep ocean. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 39(1), 57–87. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.39.050905.110227>
- Gill, A. E. (1982). *Atmosphere-ocean dynamics*. International Geophysics Series, (Vol. 30, p. 662).
- Gonzalez-Haro, C., Isern-Fontanet, J., Tandeo, P., & Autret, E. (2019). High-resolution currents from the synergy between Infrared SST and altimetry. In *LPS 2019: Living Planet Symposium*.
- Haren, H. V., Laurent, L. S., & Marshall, D. (2004). Small and mesoscale processes and their impact on the large scale: An introduction. *Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography*, 51(25), 2883–2887. <https://doi.org/10.1016/j.dsrr.2004.09.010>
- Kelly, S. M., & Lermusiaux, P. F. J. (2016). Internal-tide interactions with the Gulf Stream and Middle Atlantic Bight shelfbreak front. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 121(8), 6271–6294. <https://doi.org/10.1002/2016JC011639>
- Klein, P., & Lapeyre, G. (2009). The oceanic vertical pump induced by mesoscale and submesoscale turbulence. *Annual review of Marine Science*, 1, 351–375. <https://doi.org/10.1146/annurev.marine.010908.163704>
- Le Dimet, F.-X., & Talagrand, O. (1986). Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: Theoretical aspects. *Tellus*, 38A(2), 97–110. <https://doi.org/10.1111/j.1600-0870.1986.tb00459.x>
- Le Guillou, F., Metref, S., Cosme, E., Ubelmann, C., Ballarotta, M., Le Sommer, J., & Verron, J. (2021). Mapping altimetry in the forthcoming swot era by back-and-forth nudging a one-layer quasigeostrophic model. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 38(4), 697–710. <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-20-0104.1>
- McWilliams, J. C. (2016). Submesoscale currents in the ocean. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 472(2189), 20160117. <https://doi.org/10.1098/rspa.2016.0117>
- McWilliams, J. C., Gula, J., & Molemaker, M. J. (2019). The Gulf Stream north wall: Ageostrophic circulation and frontogenesis. *Journal of Physical Oceanography*, 49(4), 893–916. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-18-0203.1>
- Morrow, R., Fu, L.-L., Ardhuin, F., Benkiran, M., Chapron, B., Cosme, E., et al. (2019). Global observations of fine-scale ocean surface topography with the surface water and ocean topography (swot) mission. *Frontiers in Marine Science*, 6, 232. <https://doi.org/10.3389/fmars.2019.00232>
- Nash, J., Kelly, S., Shroyer, E., Moum, J., & Duda, T. (2012). The unpredictable nature of internal tides on continental shelves. *Journal of Physical Oceanography*, 42, 1981–2000. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-12-028.1>
- Nelson, A. D., Arbic, B. K., Zaron, E. D., Savage, A. C., Richman, J. G., Buijsman, M. C., & Shriver, J. F. (2019). Toward realistic nonstationarity of semidiurnal baroclinic tides in a hydrodynamic model. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 124(9), 6632–6642. <https://doi.org/10.1029/2018JC014737>
- Olbers, D. J. (1981). The propagation of internal waves in a geostrophic current. *Journal of Physical Oceanography*, 11(9), 1224–1233. [https://doi.org/10.1175/1520-0485\(1981\)011<1224:TPOIWI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0485(1981)011<1224:TPOIWI>2.0.CO;2)
- Ponte, A. L., & Klein, P. (2015). Incoherent signature of internal tides on sea level in idealized numerical simulations. *Geophysical Research Letters*, 42(5), 1520–1526. <https://doi.org/10.1002/2014GL062583>
- Ponte, A. L., Klein, P., Dunphy, M., & Le Gentil, S. (2017). Low-mode internal tides and balanced dynamics disentanglement in altimetric observations: Synergy with surface density observations. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 122(3), 2143–2155. <https://doi.org/10.1002/2016JC012214>
- Qiu, B., Chen, S., Klein, P., Wang, J., Torres, H., Fu, L.-L., & Menemenlis, D. (2018). Seasonality in transition scale from balanced to unbalanced motions in the world ocean. *Journal of Physical Oceanography*, 48, 591–605. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-17-0169.1>
- Rainville, L., & Pinkel, R. (2006). Propagation of low-mode internal waves through the ocean. *Journal of Physical Oceanography*, 36(6), 1220–1236. <https://doi.org/10.1175/JPO2889.1>
- Ray, R. D., & Zaron, E. D. (2011). Non-stationary internal tides observed with satellite altimetry. *Geophysical Research Letters*, 38(17), L17609. <https://doi.org/10.1029/2011GL048617>
- Ray, R. D., & Zaron, E. D. (2016). M_2 internal tides and their observed wavenumber spectra from satellite altimetry. *Journal of Physical Oceanography*, 46(1), 3–22. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-15-0065.1>
- Robert, C., Durbiano, S., Blayo, E., Verron, J., Blum, J., & Le Dimet, F.-X. (2005). A reduced-order strategy for 4d-var data assimilation. *Journal of Marine Systems*, 57(1–2), 70–82. <https://doi.org/10.1016/j.jmarsys.2005.04.003>
- Sadourny, R. (1975). The dynamics of finite-difference models of the shallow-water equations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 32(4), 680–689. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1975\)032<0680:TDOFDM>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1975)032<0680:TDOFDM>2.0.CO;2)

- Taburet, G., Sanchez-Roman, A., Ballarotta, M., Pujol, M.-I., Legeais, J.-F., Fournier, F., & Dibarboure, G. (2019). DUACS DT2018: 25 years of reprocessed sea level altimetry products. *Ocean Science*, 15(5), 1207–1224. <https://doi.org/10.5194/os-15-1207-2019>
- Torres, H. S., Klein, P., Siegelman, L., Qiu, B., Chen, S., Ubelmann, C., et al. (2019). Diagnosing ocean-wave-turbulence interactions from space. *Geophysical Research Letters*, 46(15), 8933–8942. <https://doi.org/10.1029/2019GL083675>
- Tseng, P. (1990). Further applications of a splitting algorithm to decomposition in variational inequalities and convex programming. *Mathematical Programming*, 48(1), 249–263. <https://doi.org/10.1007/BF01582258>
- Ubelmann, C., Klein, P., & Fu, L.-L. (2015). Dynamic interpolation of sea surface height and potential applications for future high-resolution altimetry mapping. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 32(1), 177–184. <https://doi.org/10.1175/JTECH-D-14-00152.1>
- Whalen, C. B., de Lavergne, C., Naveira Garabato, A. C., Klymak, J. M., MacKinnon, J. A., & Sheen, K. L. (2020). Internal wave-driven mixing: Governing processes and consequences for climate. *Nature Reviews Earth & Environment*, 1(11), 606–621. <https://doi.org/10.1038/s43017-020-0097-z>
- Wunsch, C., & Ferrari, R. (2004). Vertical mixing, energy, and the general circulation of the oceans. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36(1), 281–314. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.36.050802.122121>
- Zaron, E. D. (2017). Mapping the nonstationary internal tide with satellite altimetry. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 122(1), 539–554. <https://doi.org/10.1002/2016JC012487>
- Zaron, E. D., & Egbert, G. D. (2014). Time-variable refraction of the internal tide at the Hawaiian ridge. *Journal of Physical Oceanography*, 44(2), 538–557. <https://doi.org/10.1175/JPO-D-12-0238.1>
- Zhao, Z. (2016). Internal tide oceanic tomography: ITOT. *Geophysical Research Letters*, 43(17), 9157–9164. <https://doi.org/10.1002/2016GL070567>

Chapitre 6

Vers la cartographie simultanée des dynamiques équilibrée et de marée interne à partir des données SWOT

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté et testé une méthode de minimisation alternée permettant de cartographier conjointement et itérativement les dynamiques des mouvements équilibrés (BMs ; pour *Balanced Motions*) et de marée interne (ITs ; pour *Internal Tides*) dans un contexte expérimental idéalisé. Les deux dynamiques étaient estimées alternativement par deux méthodes d'assimilation de données spécifiques : le BFN-QG pour les BMs, le 4Dvar-SW pour les ITs. La référence utilisée dans cette étude simulait la dynamique d'onde interne d'une seule fréquence de marée et un seul mode spatial et les observations étaient complètes en espace (i.e. avec un échantillonnage spatial parfait). Dans ce contexte, la méthode donne de très bonnes performances en estimant séparément environ 80% du signal propre à chaque dynamique.

L'objectif de ce chapitre est de poursuivre l'étude du chapitre 5 en élaborant une expérience d'OSSE réaliste, où la référence simule une dynamique des ITs complexe et les observations altimétriques sont échantillonnées sur des orbites réalistes. Nous nous focalisons sur la région du courant californien, où une campagne de mesure sera déployée pour la calibration et la validation des données SWOT.

Lorsqu'elle est appliquée à un contexte réaliste, la minimisation alternée implémentée avec les méthodes du BFN-QG et du 4Dvar-SW peine à fournir de bonnes performances de reconstruction. La principale limite réside dans l'incapacité du BFN-QG à suffisamment

filtrer la signature de la dynamique d'ondes internes lorsque celle-ci est complexe. De nouveaux développements sont alors nécessaires pour adapter les outils d'assimilation de données pour la séparation ondes/tourbillons dans un contexte réaliste.

Le chapitre est organisé de la manière suivante. Dans un premier temps, nous détaillons la mise en place de l'OSSE en insistant sur la méthodologie développée pour extraire les champs BMs et ITs de référence. Dans un second temps, nous présentons les limitations de la méthode de minimisation alternée pour reconstruire et séparer les dynamiques BMs et ITs dans un contexte réaliste. Dans un troisième temps, nous présentons une nouvelle méthode d'assimilation de données développée au cours de cette thèse qui permet de reconstruire et séparer les deux dynamiques simultanément. Enfin, nous présentons quelques résultats préliminaires encourageants.

6.2 Contexte expérimental réaliste

Nous utilisons la SSH issue de la simulation llc4320 (Menemenlis et al., 2021) du modèle MITgcm (Marshall et al., 1997) pour définir l'état de référence de la surface de l'océan. Cette simulation fournit des sorties horaires globales à très haute résolution spatiale ($1/48^\circ$ sur 90 niveaux verticaux). Le modèle est forcé en surface par une pression équivalente aux marées lunaires (semi-diurnes) et solaires (diurnes) (Weis et al., 2008), permettant ainsi de simuler la dynamique de marée interne. Le modèle est aussi forcé par les vents, ce qui génère une dynamique ondulatoire qui s'ajoute à la dynamique de marée interne. Notons que cette dynamique n'était pas présente dans la simulation de référence utilisée dans le chapitre 5.

Plusieurs études ont validé les champs modélisés par la simulation llc4320 en les comparant à des observations réelles. L'énergie cinétique tourbillonnaire simulée est en accord avec celle déduite des cartes DUACS en dehors de la bande équatoriale (Qiu et al., 2018). L'échelle de transition L_t (définie comme l'échelle en dessous de laquelle la dynamique d'ondes internes domine la dynamique équilibrée) calculée à partir des champs simulés se compare relativement bien avec celle déduite d'observations *in situ* (Qiu et al., 2018). La dynamique ondulatoire simulée produit des spectres de SSH en accord avec ceux déduits de plusieurs profils verticaux *in situ* (Savage et al., 2017).

La région d'intérêt est située au large de la Californie (120°W – 130°W x 30°N – 40°N), où sera déployée une campagne de mesure *in situ* pour calibrer et valider les données SWOT pendant la première phase de la mission (Morrow et al., 2019). Cette région est marquée par une forte activité biologique intensifiée en été, lorsque le courant d'est provoque une remontée des nutriments à la surface le long de la côte (Checkley and Barth, 2009). L'activité

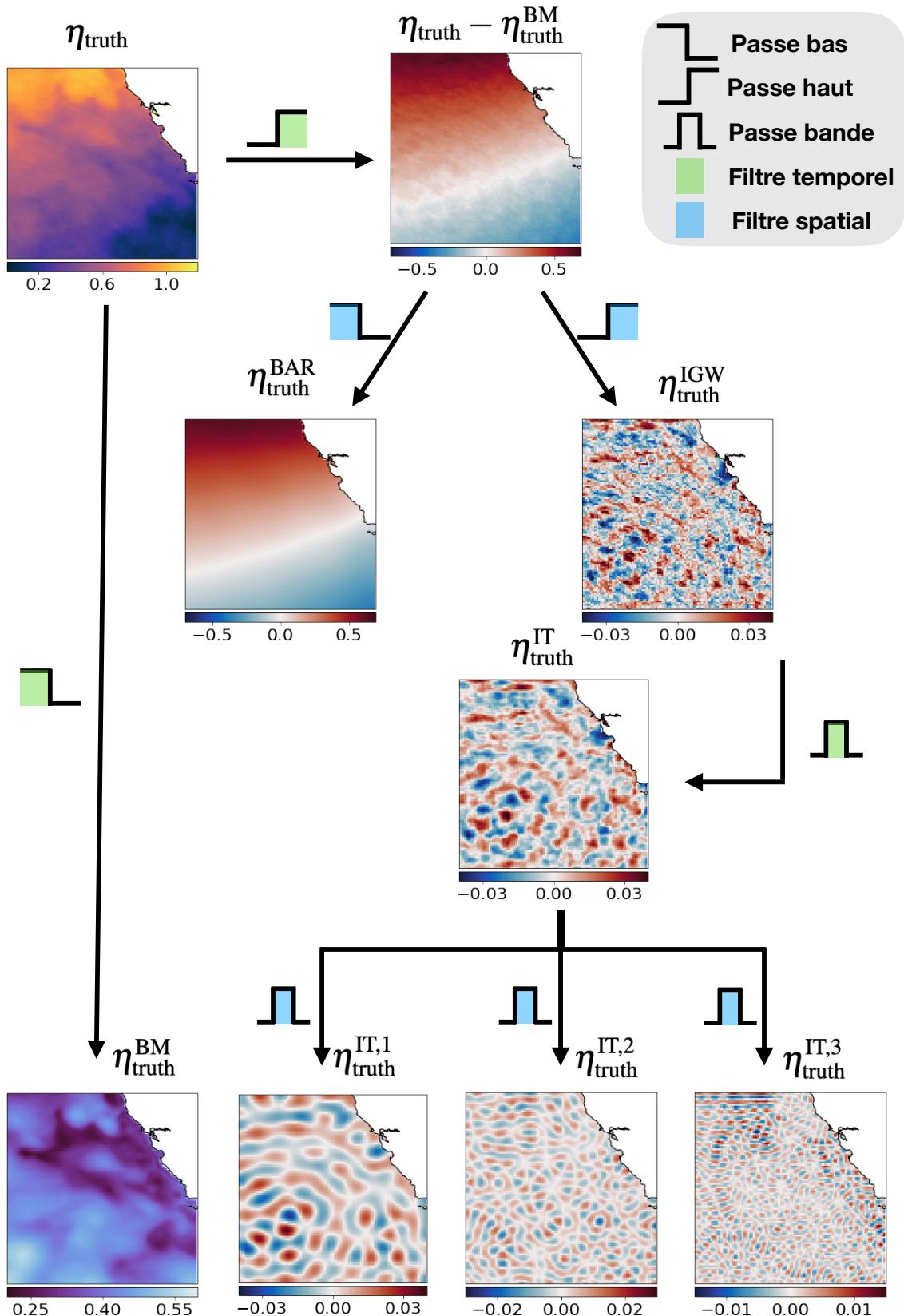


FIGURE 6.1 Chaîne de traitement du champ brut (en haut à gauche) permettant d'extraire une composante lente et équilibrée (en bas à gauche) et les trois premiers modes spatiaux de marée interne semi-diurne (en bas à droite). Les flèches représentent des opérations de filtrage spatial ou temporel. Les échelles de couleur sont exprimées en mètre.

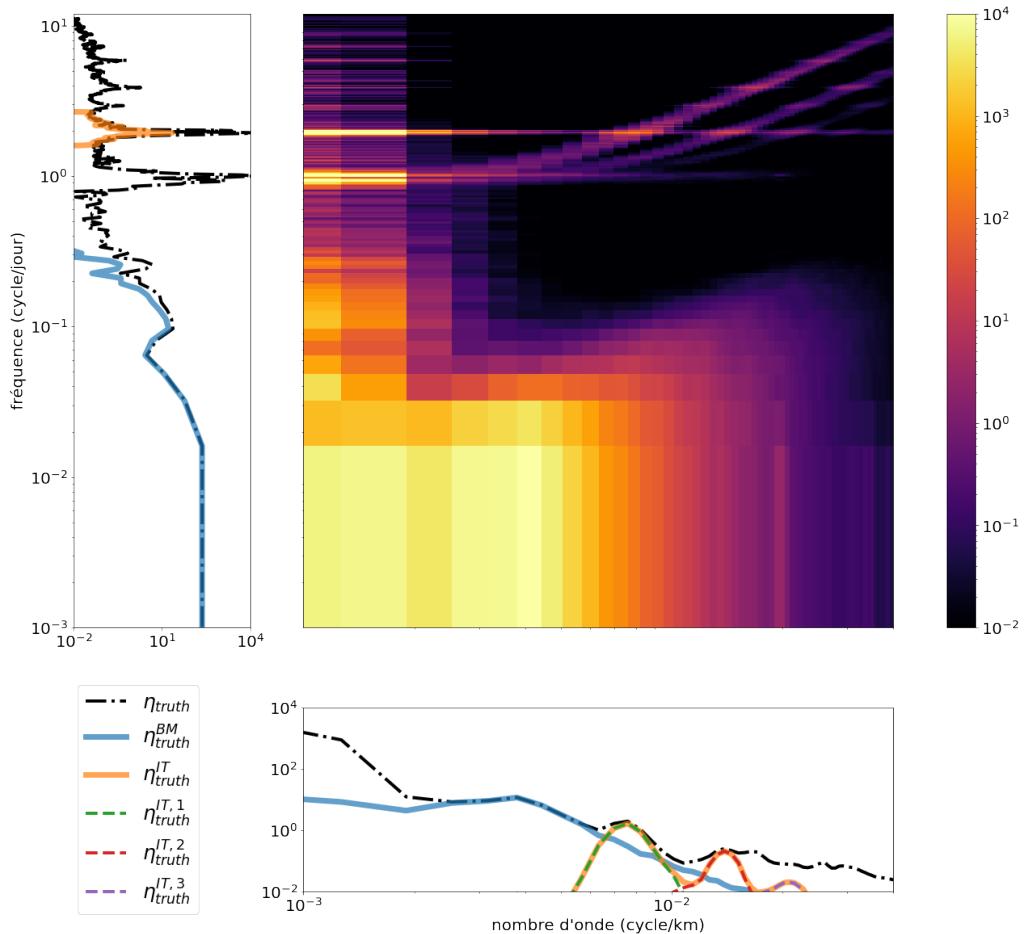


FIGURE 6.2 Spectre 2D temps-espace de l'énergie de η_{truth} en m^2 . Les graphiques en bas et à gauche sont les spectres 1D en temps et en espace.

tourbillonnaire en surface est dominée par des cyclones de tailles comprises entre 30km et 160km se propageant vers l'ouest à une vitesse de quelques km par jour (Kurian et al., 2011).

Une chaîne de traitement a été développée pour extraire les composantes $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ et $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$ à partir de la donnée brute η_{truth} (figure 6.1). La composante lente et équilibrée $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ est obtenue en appliquant un filtre temporel passe-bas à η_{truth} . Ensuite, on applique un filtre spatial passe-bas sur le résidus rapide de cette décomposition, $\eta_{\text{truth}} - \eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$, pour extraire la composante de marée barotrope $\eta_{\text{truth}}^{\text{BAR}}$. Le résidu rapide de petite échelle spatiale de cette décomposition, noté $\eta_{\text{truth}}^{\text{IGW}}$, représente la signature d'ondes internes. Le spectre temporel de $\eta_{\text{truth}}^{\text{IGW}}$ laisse apparaître deux pics d'énergie, centrés approximativement autour de 12h (marée interne semi-diurne) et autour de la fréquence de Coriolis (ondes internes et inertielles excitées par les vents). La composante de marée interne $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$ est obtenue en appliquant un filtre temporel passe-bande (centré autour de 12h) à chaque pixel de $\eta_{\text{truth}}^{\text{IGW}}$. De plus, à chaque pas de temps, on applique trois filtres spatiaux passe-bande successifs à $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$ pour extraire les trois premiers modes baroclines $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT},1}$, $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT},2}$ et $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT},3}$. Les fréquences de coupures ont été choisies en se référant à l'étude de Zhao et al. (2019). La figure 6.2 montre la distribution spectrale de l'énergie du champ référence η_{truth} et de ses composantes $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ et $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$ en fonction des échelles temporelles et spatiales. Cette figure démontre le fait que $\eta_{\text{truth}}^{\text{BM}}$ et $\eta_{\text{truth}}^{\text{IT}}$ ont des échelles spatiales qui se chevauchent (c.f. figure 6.1) tandis que leurs échelles temporelles sont bien distinctes.

À l'inverse du chapitre 5, les observations synthétiques sont cette fois-ci extraites sur des orbites réelles. Pour simplifier le problème et se concentrer sur la problématique de séparation ondes/tourbillons, on fait l'hypothèse que la composante de marée barotrope $\eta_{\text{truth}}^{\text{BAR}}$ est connue. Par conséquent, les observations sont extraite à partir du champ $\eta_{\text{truth}} - \eta_{\text{truth}}^{\text{BAR}}$. Pour SWOT, on choisit l'orbite à 1 jour propre à la première phase de la mission. La région d'étude est choisie de façon à couvrir une passe ascendante et descendante du satellite (l'intersection de ces deux passes est appelée *crossover*). SWOT observe donc la région d'étude deux fois par jour. En plus des données SWOT, on ajoute des observations altimétriques conventionnelles nadirs, extraites sur les orbites réelles de la constellation de 2019 (c.f. chapitre 4). Cette constellation est composée de 6 altimètres : Jason-3, Cryosat-2, SARAL/AltiKa, HaiYang-2 et Sentinel-3A/B. La figure 6.3 illustre un exemple d'une scène de référence et de l'échantillonnage du réseau d'observation considéré.

6.3 Limites de la méthode de minimisation alternée

Nous avons appliqué la méthode de minimisation alternée (décrite au chapitre 5) au système expérimental réaliste décrit dans la section 6.2. Pour le BFN-QG, nous avons utilisé

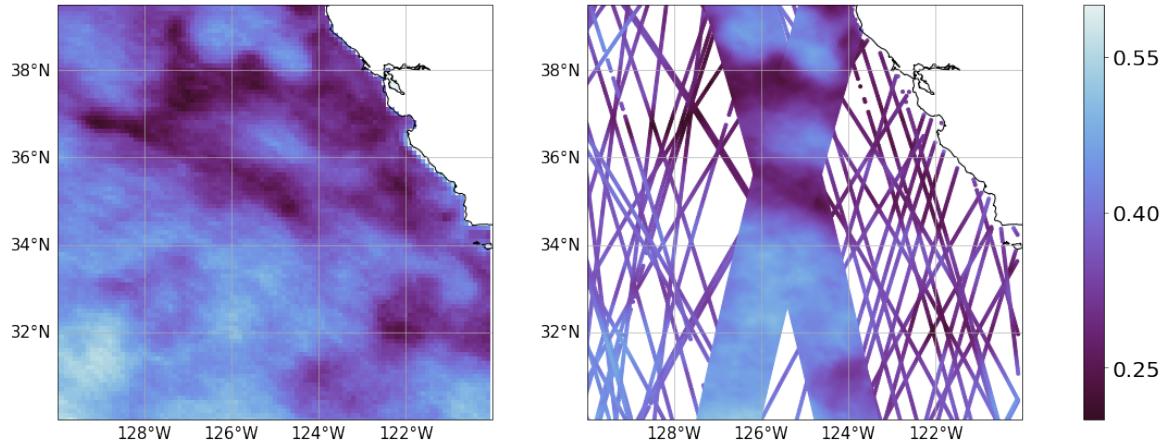


FIGURE 6.3 À gauche : SSH de référence (en mètre) le 1er août 2012, corrigée de la marée barotrope. À droite : échantillonnage du réseau d'observation, composé des deux fauchées SWOT qui tombent à cette date et des traces nadirs ayant lieu sur une période de 10 jours autour de cette date.

la version présentée au chapitre 3. Pour le 4Dvar-SW, il a été nécessaire d'implémenter un opérateur d'observation linéaire H (et son adjoint H^T) pour projeter l'état du modèle sur les traces SWOT et nadirs. Avant d'appliquer la minimisation alternée, nous avons vérifié que le BFN-QG et le 4Dvar-SW donnaient de bonnes performances de reconstruction lorsque les observations ne contiennent que les signaux des dynamiques cibles (c.f. scénario "*idealized*" dans le chapitre 5).

La méthode de minimisation alternée peine à fournir de bonnes performances de reconstruction lorsqu'elle est appliquée à un contexte expérimental réaliste. Comme illustré sur la figure 6.4, la dynamique des ITs n'est pas correctement estimée par ce système. Ces mauvaises performances semblent en partie causée par le BFN-QG qui ne filtre pas suffisamment la signature des ITs, même en réduisant drastiquement le poids des observations sur la dynamique. Une solution serait d'implémenter un terme de nudging multi-spectral pour favoriser l'impact de certaines échelles sur la dynamique QG (Von Storch et al., 2000). Une seconde solution serait de considérer les corrélations spatio-temporelles de la dynamique des BMs dans le calcul du coefficient de nudging K . Nous avons décidé de ne pas nous orienter dans de telles complexifications du BFN-QG car nous perdrions un atout majeur de la méthode : sa simplicité.

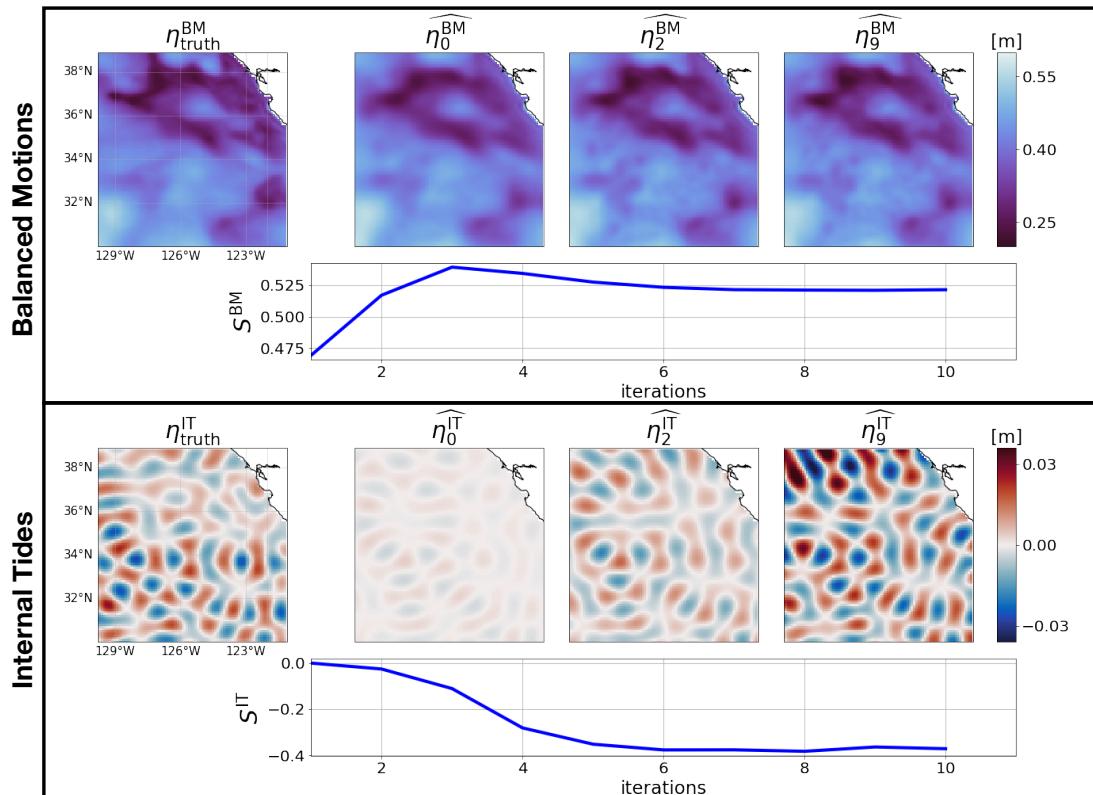


FIGURE 6.4 Performance d'une expérience de minimisation alternée en fonction des itérations de l'algorithme. Les scores de reconstructions S^{BM} et S^{IT} sont calculés de la même manière que dans le chapitre 5. Un score de 1 signifie que la reconstruction est parfaite tandis qu'un score négatif indique que la variance de l'erreur de cartographie est supérieure à la variance du signal de référence.

6.4 Implémentation d'une méthode de minimisation simul-tanée

Dans cette section, nous présentons une nouvelle méthode d'assimilation de données permettant de cartographier et séparer simultanément les signaux BM et IT. Les deux dynamiques sont toujours simulées par les modèles QG et SW. Le point central de cette nouvelle méthode repose sur l'ajout d'un terme de forçage dans l'équation du QG, variant dans le temps et l'espace, que l'on va estimer. Ceci permet de formuler le problème inverse complet comme la minimisation d'une seule et unique fonction coût composée d'un premier terme spécifique aux BMs et un second terme spécifique aux ITs. Cette minimisation est réalisée par un 4Dvar. À l'instar du 4Dvar-SW, nous proposons d'utiliser une base réduite pour l'expression des variables de contrôle pour chaque dynamique. Cette nouvelle méthode d'assimilation est dénommée 4Dvar-QGSW dans la suite.

6.4.1 Modèles dynamiques

Pour la modélisation de la dynamique des BMs, nous proposons d'ajouter un terme de forçage à l'équation de propagation du QG :

$$\frac{\partial \eta^{\text{BM}}}{\partial t} = \mathcal{M}_{\text{QG}}(\eta^{\text{BM}}) + \phi^{\text{BM}} \quad (6.1)$$

où η^{BM} le champ de SSH relatifs aux BMs, \mathcal{M}_{QG} est l'opérateur non linéaire du modèle QG et ϕ^{BM} est le terme de forçage qui compense la partie de la dynamique des BMs non reproduite par le QG. En pratique, ϕ^{BM} est un champ 2D de SSH qui varie dans le temps. En notant η_0^{BM} la condition initiale, la trajectoire spatio-temporelle η^{BM} est entièrement déterminée par η_0^{BM} et ϕ^{BM} :

$$\eta_{(t,x,y)}^{\text{BM}} = \mathcal{M}_{\text{BM}}(\eta_0^{\text{BM}}, \phi^{\text{BM}}) \quad (6.2)$$

où \mathcal{M}_{BM} est l'opérateur intégrant l'équation 6.1 dans le temps, t la coordonnée temporelle et (x, y) les coordonnées spatiales.

Pour la modélisation de la dynamique des ITs, on utilise la même formulation du modèle SW présenté dans le chapitre 3. On écrit alors :

$$\eta_{(t,x,y)}^{\text{IT}} = \mathcal{M}_{\text{IT}}(\eta_0^{\text{IT}}, \phi^{\text{IT}}) \quad (6.3)$$

où \mathcal{M}_{IT} est l'opérateur rassemblant les équations dynamiques du modèle SW, η_0^{IT} une condition initiale, ϕ^{IT} représente les paramètres du modèle, i.e. la hauteur équivalente H_e et les conditions aux frontières η_{ext} . Notons qu'à la différence de la dynamique des BMs où ϕ^{BM} représente l'erreur du modèle QG, ϕ^{IT} intervient directement dans les équations du modèle SW.

Soient $\eta = \eta^{\text{BM}} + \eta^{\text{IT}}$ la SSH totale, et $\phi = (\phi^{\text{BM}} \ \phi^{\text{IT}})^T$ l'ensemble des paramètres de l'opérateur dynamique $\mathcal{M} = (\mathcal{M}_{\text{BM}} \ \mathcal{M}_{\text{IT}})$. En négligeant l'impact des conditions initiales, la trajectoire spatio-temporelle de η est entièrement déterminée par ϕ :

$$\eta_{(t,x,y)} = \mathcal{M}(\phi) = \mathcal{M}_{\text{BM}}(\phi^{\text{BM}}) + \mathcal{M}_{\text{IT}}(\phi^{\text{IT}}) \quad (6.4)$$

6.4.2 4Dvar

De la même manière que pour le 4Dvar-SW présenté dans le chapitre 5, nous cherchons l'ensemble des paramètres optimaux $\phi_{\text{opt}} = (\phi_{\text{opt}}^{\text{BM}} \ \phi_{\text{opt}}^{\text{IT}})^T$ des modèles \mathcal{M}_{BM} et \mathcal{M}_{IT} qui donnent une trajectoire $\eta[t, x, y]$ proche des observations η_{obs} , tout en respectant des statistiques de variabilité connues *a priori*. Ceci se traduit par la minimisation de la fonction coût J suivante :

$$J(\phi) = (\phi - \phi_b)^T B^{-1} (\phi - \phi_b) + (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\phi))^T R^{-1} (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\phi)) \quad (6.5)$$

où ϕ_b est un ensemble *a priori* des paramètres, B est la matrice de covariance *a priori* des paramètres, R est la matrice de covariance des erreurs d'observation et H est l'opérateur d'observation qui projette la trajectoire du modèle sur les traces altimétriques. La minimisation de J s'opère en cherchant le zéro du gradient ∇J :

$$\nabla J(\phi) = 2B^{-1}(\phi - \phi_b) - 2M^* \cdot H^T \cdot R^{-1} (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\phi)) \quad (6.6)$$

où $M^* = (M_{\text{BM}}^* \ M_{\text{IT}}^*)^T$, avec M_{BM}^* et M_{IT}^* les opérateurs adjoints des modèles \mathcal{M}_{BM} et \mathcal{M}_{IT} .

6.4.3 Réduction d'ordre

Formulation du 4Dvar d'ordre réduit

La résolution du problème inverse est réalisée dans des espaces d'ordre réduit afin de rendre la minimisation de la fonction coût 6.5 plus sûre. En pratique, ces espaces sont choisis de façon à réduire suffisamment le nombre de degrés de liberté du système d'assi-

milation tout en respectant au maximum les variabilités spatio-temporelles des dynamiques. Mathématiquement, on formule la réduction d'ordre par :

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi^{\text{BM}} \\ \phi^{\text{IT}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma^{\text{BM}} & 0 \\ 0 & \Gamma^{\text{IT}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi^{\text{BM}} \\ \psi^{\text{IT}} \end{bmatrix} = \Gamma \psi \quad (6.7)$$

où Γ^{BM} et Γ^{IT} sont les matrices de passage des espaces réduits aux espaces des paramètres des modèles dynamiques. ψ^{BM} et ψ^{IT} sont les coordonnées des paramètres dans les espaces réduits. La matrice B s'écrit alors :

$$B = \Gamma Q \Gamma^T \quad (6.8)$$

où Q est la matrice de covariance *a priori* des variables de contrôle exprimées dans les espaces réduits. Un intérêt majeur de la réduction d'ordre est de choisir des composantes indépendantes les unes des autres, afin d'avoir une matrice Q diagonale.

La fonction coût s'exprime alors aisément en fonction du nouveau vecteur de contrôle d'ordre réduit ψ :

$$J(\psi) = (\psi - \psi_b)^T Q^{-1} (\psi - \psi_b) + (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\Gamma \psi))^T R^{-1} (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\Gamma \psi)) \quad (6.9)$$

De même pour son gradient :

$$\nabla J(\psi) = 2Q^{-1}(\psi - \psi_b) - 2\Gamma^T \cdot M^* \cdot H^T \cdot R^{-1} (\eta_{\text{obs}} - H \cdot \mathcal{M}(\Gamma \psi)) \quad (6.10)$$

Base réduite pour la dynamique BM

Le champ spatio-temporel ϕ^{BM} qui force la dynamique QG via l'équation 6.1 est décomposé en une multitude d'ondelettes spatio-temporelles. Ces ondelettes sont construites en suivant la même méthodologie que Ubelmann et al. (2021). Les longueurs d'onde sont comprises dans une gamme d'échelles que l'on veut estimer (typiquement entre 50km et 800km). Chaque ondelette est localisée dans l'espace et le temps, centrée autour d'une localisation géographique et un instant précis, avec une certaine extension spatiale et temporelle. Deux ondelettes voisines (dans le temps ou dans l'espace) se chevauchent afin de recouvrir l'ensemble de l'espace-temps. De plus, les ondelettes ont des vecteurs d'onde différents permettant de reproduire toute forme de signature spatiale. Mathématiquement, l'évolution spatio-temporelle du i -ième élément de Γ^{BM} de la base d'ondelette, centré autour du point (t_i, x_i, y_i) s'écrit :

$$\Gamma^{\text{BM}}[i](t, x, y) = \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda_i} [\cos(\theta_i)(x - x_i) + \sin(\theta_i)(y - y_i)] + \Phi_i \right) \Lambda(t, x, y) \quad (6.11)$$

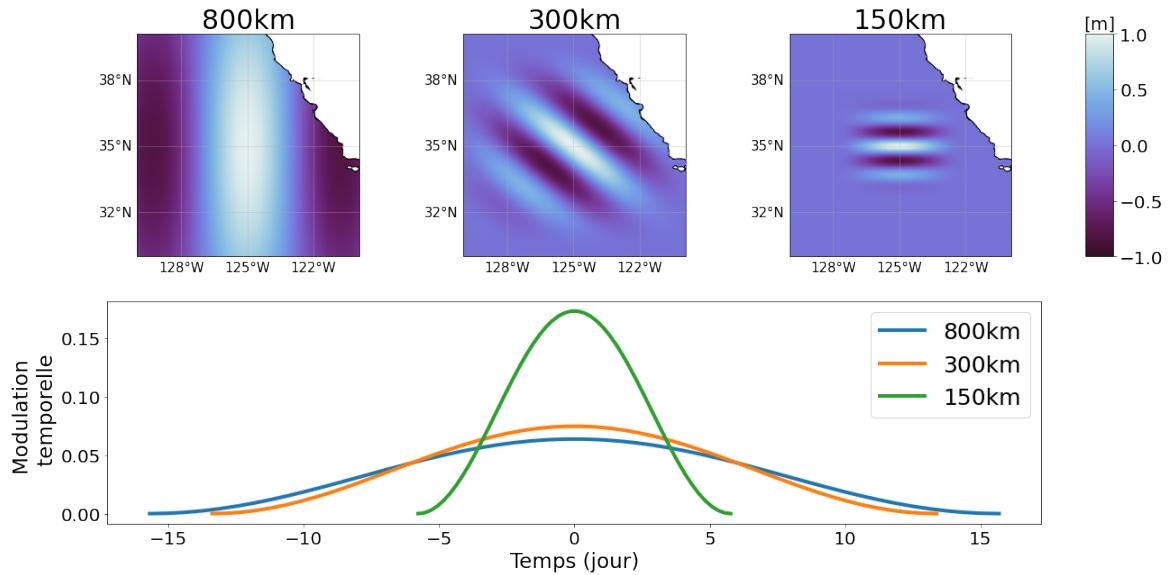


FIGURE 6.5 En haut : signature spatiale de trois éléments de la base d'ondelette spécifique à la dynamique BM, centrés sur le point de coordonnée $(125^{\circ}\text{W}, 35^{\circ}\text{N})$ et pour différentes longueurs d'onde et directions. En bas : modulation temporelle pour chaque élément, dont l'intégrale est égale à 1.

où λ_i est la longueur d'onde de l'ondelette. θ_i est l'angle définissant sa direction par rapport à l'axe zonal, dont les valeurs sont prescrites entre 0 et 2π . Les ondelettes sont définies deux à deux et les éléments d'une paire se différencient par la valeur Φ_i , égale alternativement à 0 ou $\frac{\pi}{2}$, permettant de reproduire tout type de phase. Λ est une fonction qui localise l'ondelette dans le temps et l'espace :

$$\Lambda(t, x, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } (|\Delta t|, |\Delta x|, |\Delta y|) \geq (L_t, L_x, L_y) \\ \Lambda_0 * \cos\left(\frac{\pi \Delta t}{2L_t}\right)^2 * \cos\left(\frac{\pi \Delta x}{2L_x}\right)^2 * \cos\left(\frac{\pi \Delta y}{2L_y}\right)^2 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.12)$$

où $\Delta t = t - t_i$, $\Delta x = x - x_i$ et $\Delta y = y - y_i$. L_x et L_y sont les extensions spatiales de l'ondelette, L_t l'extension temporelle. Celles-ci sont prescrites comme $L_x = L_y = 3\lambda_i$ et L_t est égal au temps de décorrélation estimé grâce aux cartes DUACS. Notons que ce temps de décorrélation varie selon les régions du globe et est plus long (court) pour les grandes (petites) longueurs d'onde. Λ_0 est un facteur de normalisation qui permet à Λ d'avoir une intégrale temporelle unitaire. La figure 6.5 illustre la signature spatio-temporelle de trois éléments de cette base.

Base réduite pour la dynamique IT

Pour la dynamique IT, on exprime les variables de contrôle dans la même base réduite que dans le chapitre 5. Les éléments de cette base sont des fonctions de Gauss définies dans le temps et l'espace. L'élément i s'écrit :

$$\Gamma^{\text{IT}}[i](t, x, y) = e^{-\left(\frac{(t-t_i)^2}{2\tau^2}\right)} e^{-\left(\frac{\|r-r_i\|^2}{2\sigma^2}\right)} \quad (6.13)$$

où r et r_i représentent les coordonnées 2D à l'intérieur du domaine pour H_e et 1D sur les bords du domaine pour η_{ext} . τ et σ sont les échelles spatiale et temporelle des fonctions de Gauss, choisies de façon à représenter la variabilité spatio-temporelle de la dynamique IT. Chaque élément de la base se chevauche avec ses voisins (dans le temps et l'espace) afin de recouvrir l'ensemble des possibles.

6.5 Application

6.5.1 Configuration de l'assimilation

La configuration de la base Γ^{BM} modélisant la structure spatio-temporelle de la dynamique des BMs diffère de celle présentée dans Ubelmann et al. (2021) de par les valeurs prescrites aux échelles spatio-temporelles des ondelettes. Pour les échelles spatiales, la longueur d'onde minimale est choisie à 150km (au lieu de 80km dans Ubelmann et al. (2021)) car le modèle QG génère de la petite échelle de lui-même (via la conversion de la SSH en vorticité potentielle). Par ailleurs, dans Ubelmann et al. (2021), les ondelettes signent directement sur la SSH alors que dans notre formulation, elles apparaissent sous forme de flux. Cela implique que dans la configuration de Ubelmann et al. (2021), la signature en SSH d'une ondelette apparaît puis disparaît d'elle-même. À l'inverse, dans notre configuration, la signature d'une ondelette persiste dans le temps. Ainsi, une ondelette dans Ubelmann et al. (2021) est équivalente à la juxtaposition de deux ondelettes successives (dont les amplitudes sont opposées) dans notre configuration. Par conséquent, nous avons divisor par deux les échelles temporelles des ondelettes par rapport à Ubelmann et al. (2021) afin de permettre l'estimation de la même variabilité temporelle.

La base Γ^{IT} est réglée de façon à estimer le premier mode barocline de la composante M2. Les échelles des ondes entrantes η_{ext} (H_e) sont fixées à 200 km (300 km) en espace et 10 jours (15 jours) en temps.

La formulation du 4Dvar-QGSW (équations 6.5 et 6.6) avec les bases réduites Γ^{BM} et Γ^{IT} permet de prescrire des matrices de covariances diagonales : $B = \text{diag}(\sigma_B^2)$ et $R = \text{diag}(\sigma_R^2)$.

Pour la dynamique BM, la valeur de σ_B est fonction de l'échelle spatiale de l'ondelette considérée et est déterminée grâce aux spectres altimétriques. Pour la dynamique IT, la valeur de σ_B est égale à 10^{-3} m (0.1m) pour $\eta_{ext}(H_e)$. D'autre part, les coefficients de la matrice R diffèrent selon le type d'instrument. Pour les observations au nadir, on a $\sigma_R = 0.05$ m, et pour SWOT, $\sigma_R = 5$ m. Cet écart considérable, fixé empiriquement, est probablement dû à l'erreur de représentativité qui est bien plus importante pour SWOT que pour les nadirs. En effet, la signature de processus non modélisés par \mathcal{M}_{BM} et \mathcal{M}_{IT} (modes baroclines supérieurs et ondes de gravité excitées par les vents par exemple) est bien plus intense dans les observations SWOT du fait de sa haute résolution spatiale et temporelle (dans le cas de l'orbite à un jour).

6.5.2 Diagnostics

Les champs reconstruits $\widehat{\eta^{BM}}$ et $\widehat{\eta^{IT}}$ par le 4Dvar-QGSW sont comparés aux champs de référence η_{truth}^{BM} et $\eta_{truth}^{IT,1}$ (c.f. figure 6.6). On note $\widehat{\eta} = \widehat{\eta^{BM}} + \widehat{\eta^{IT}}$ le champ total reconstruit. Notons que η_{truth} contient des processus d'onde de gravité qui ne sont pas simulés par notre système, donc absents $\widehat{\eta}$.

Pour la dynamique BM, les performances sont évaluées dans l'espace spectral en temps et en espace (c.f. figure 6.7).

Pour la dynamique IT, on s'intéresse en particulier à l'estimation de la partie non stationnaire du champ d'onde (c.f. figure 6.8). Pour cela, on compare $\widehat{\eta^{IT}}$ à la composante stationnaire de $\eta_{truth}^{IT,1}$ de la vérité, calculée par analyse harmonique du champ horaire sur l'ensemble de la période temporelle de simulation (i.e un an). Notons qu'en réalité, cette composante stationnaire n'est pas connue de manière exacte. De plus, les performances sont évaluées en distinguant les directions de propagation des trains d'onde. Pour cela, nous avons suivi la méthode décrite précisément dans Gong et al. (2021) pour décomposer le signal ondulatoire en une superposition d'ondes planes. Chaque onde plane est extraite en appliquant un filtre de Fourier dans une certaine direction.

6.5.3 Résultats

Le 4Dvar-QGSW est capable de séparer simultanément les dynamiques BM et IT. Comme l'illustre la figure 6.6, la position des structures et les amplitudes sont bien estimées par rapport aux champs de référence. En moyenne, 85% (40%) de la variance de la dynamique BM (IT) est reconstruite.

La dynamique BM de grande échelle est bien reconstruite par le 4Dvar-QGSW. Les séries temporelles de la partie haute de la figure 6.7 montrent une variation lente de la SSH due à la dynamique BM sur laquelle se superpose une variation oscillante provoquée par la

dynamique IT, comme attendu. Ceci est validé quantitativement par les spectres temporels de la partie centrale de la figure 6.7 qui montrent que $\widehat{\eta^{\text{BM}}}$ impacte seulement l'énergie basse fréquence. Cependant, ces même spectres, associés au score spectral en espace, montre que la dynamique équilibrée rapide (< 20 jours) et de petite échelles spatiales (longueurs d'ondes < 90 km) n'est pas reconstruite par notre système.

Une partie de la dynamique IT reconstruite par le 4Dvar-QGSW est non stationnaire. Qualitativement, la figure 6.8 montre que $\widehat{\eta^{\text{IT}}}$ diffère notablement de la partie stationnaire du signal de référence, à la fois en amplitude et en phase. Ensuite, le pic d'énergie estimée autour de la fréquence M2 illustré par la figure 6.7 est relativement large, ce qui prouve qu'une partie du signal reproduit est non-stationnaire. Le graphique en bas à droite de la figure 6.8 permet de valider si cette non stationnarité est en phase avec la référence. Cela dépend fortement de la direction de propagation des ondes. Pour les ondes arrivant par le nord, l'ouest et le sud, notre système permet de reconstruire une plus grande part de la variabilité du signal de référence que ce qu'explique la partie stationnaire. Cela indique donc qu'une partie non stationnaire de ces ondes est correctement estimée par le 4Dvar-QGSW. En revanche, les performances du 4Dvar-QGSW sont drastiquement réduites pour l'estimation des ondes entrant par l'est du domaine. Cela est probablement dû à des processus dynamiques complexes qui ne sont pas correctement simulés par le modèle SW, comme par exemple la réflexion des ondes sur la côte. Toutefois, l'énergie des ondes entrantes par l'est est faible par rapport aux ondes entrant par les autres bords du domaine.

6.6 Conclusions

Ce chapitre a permis de poursuivre l'étude du chapitre 5 en traitant la problématique de séparation ondes-tourbillons dans un contexte expérimental réaliste. Pour cela, nous nous sommes concentrés sur une région au large de la Californie, où sera déployée une campagne de mesure *in situ* pour la calibration et la validation des données SWOT. Nous avons utilisé la simulation llc4320 du modèle MITgcm pour définir l'état de référence de la surface de l'océan. Les observations altimétriques sont extraites sur l'orbite à 1 jour de SWOT et sur cinq orbites nadirs.

La définition des champs de référence pour les deux dynamiques est bien moins aisée que dans le contexte idéalisé du chapitre 5. Ici, nous avons dû mettre en place une chaîne de traitement composée d'une succession de filtres spatio-temporels pour extraire les signatures en SSH des dynamiques équilibrée et de marée interne. Ce traitement est bien évidemment imparfait. Une manière plus élégante et plus précise pour séparer les dynamiques serait

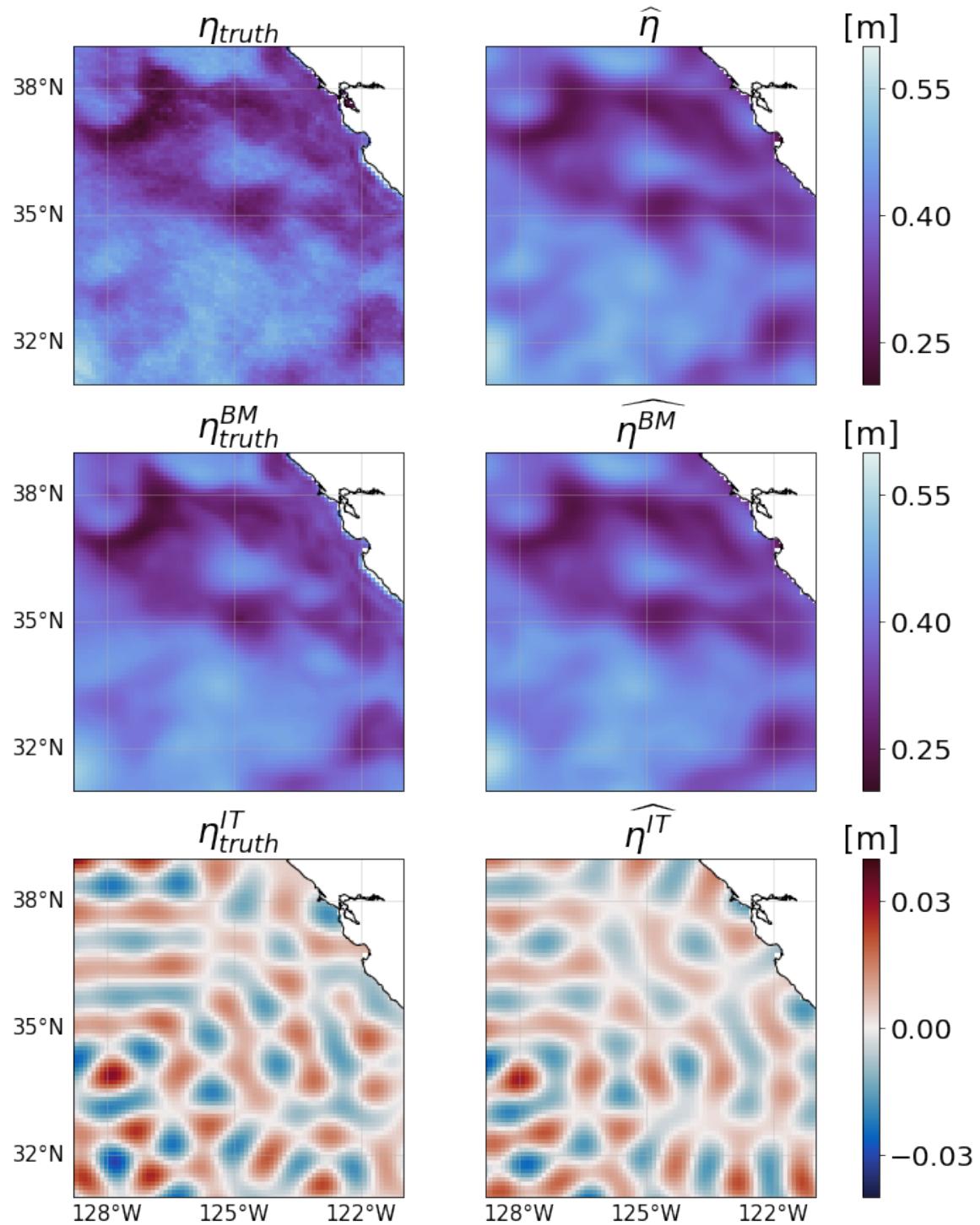


FIGURE 6.6 Illustration des champs de référence (à gauche) et reconstruits par le 4Dvar-QGSW (à droite) pour le 1er août 2012. En haut, le signal total ; au milieu, la partie équilibrée (BM) ; en bas, la partie ondulatoire (IT).

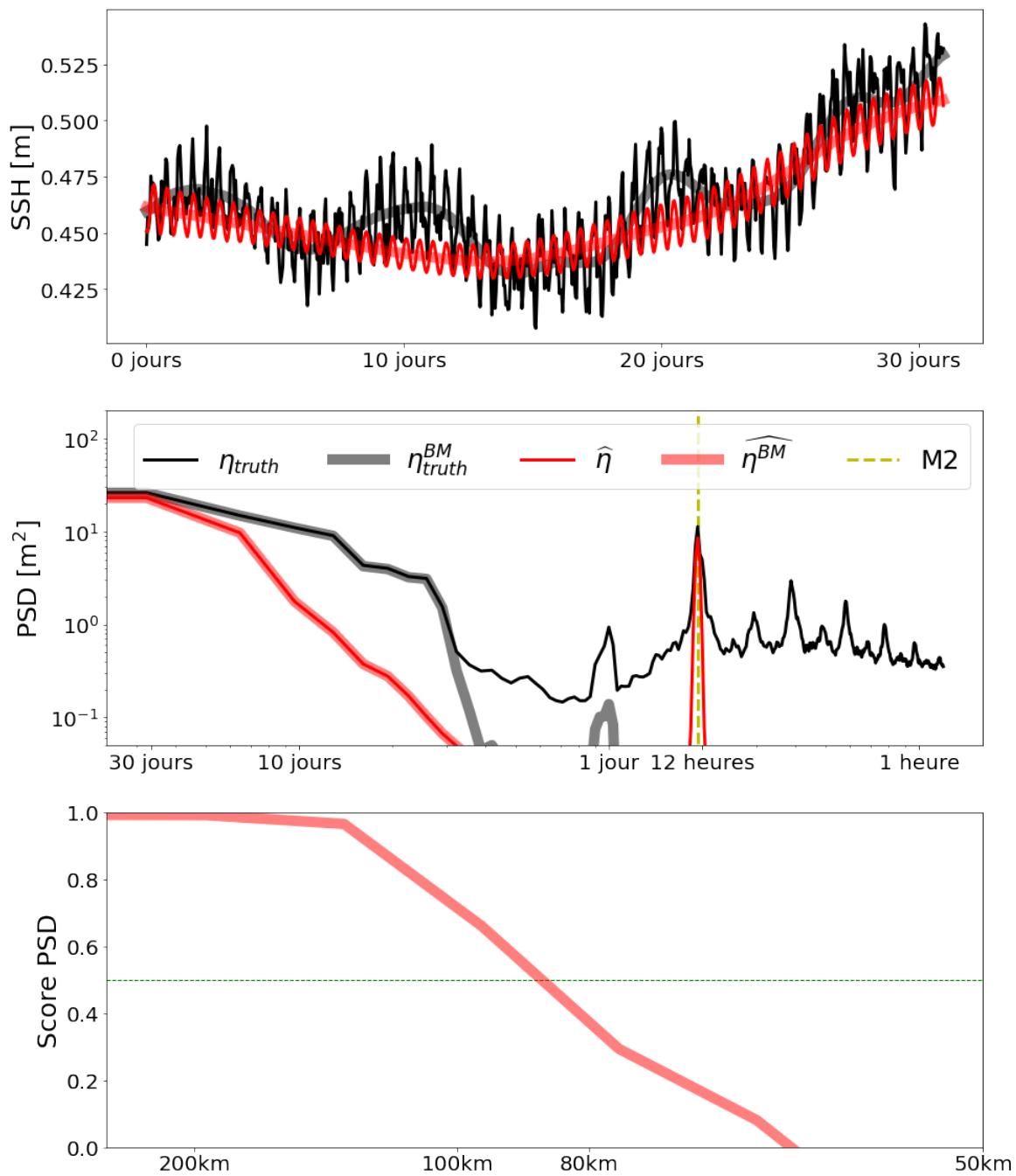


FIGURE 6.7 En haut : série temporelle de la variation de la SSH au point (20°N,-120°W). Au milieu : densité spectrale (PSD) en fonction des échelles temporelles obtenue en moyennant la contribution de tous les pixels du domaine. En bas : score de la PSD en fonction des échelles spatiales (un score de 1 indique une reconstruction parfaite ; on considère que les échelles sont résolues si le score est supérieur à 0.5).

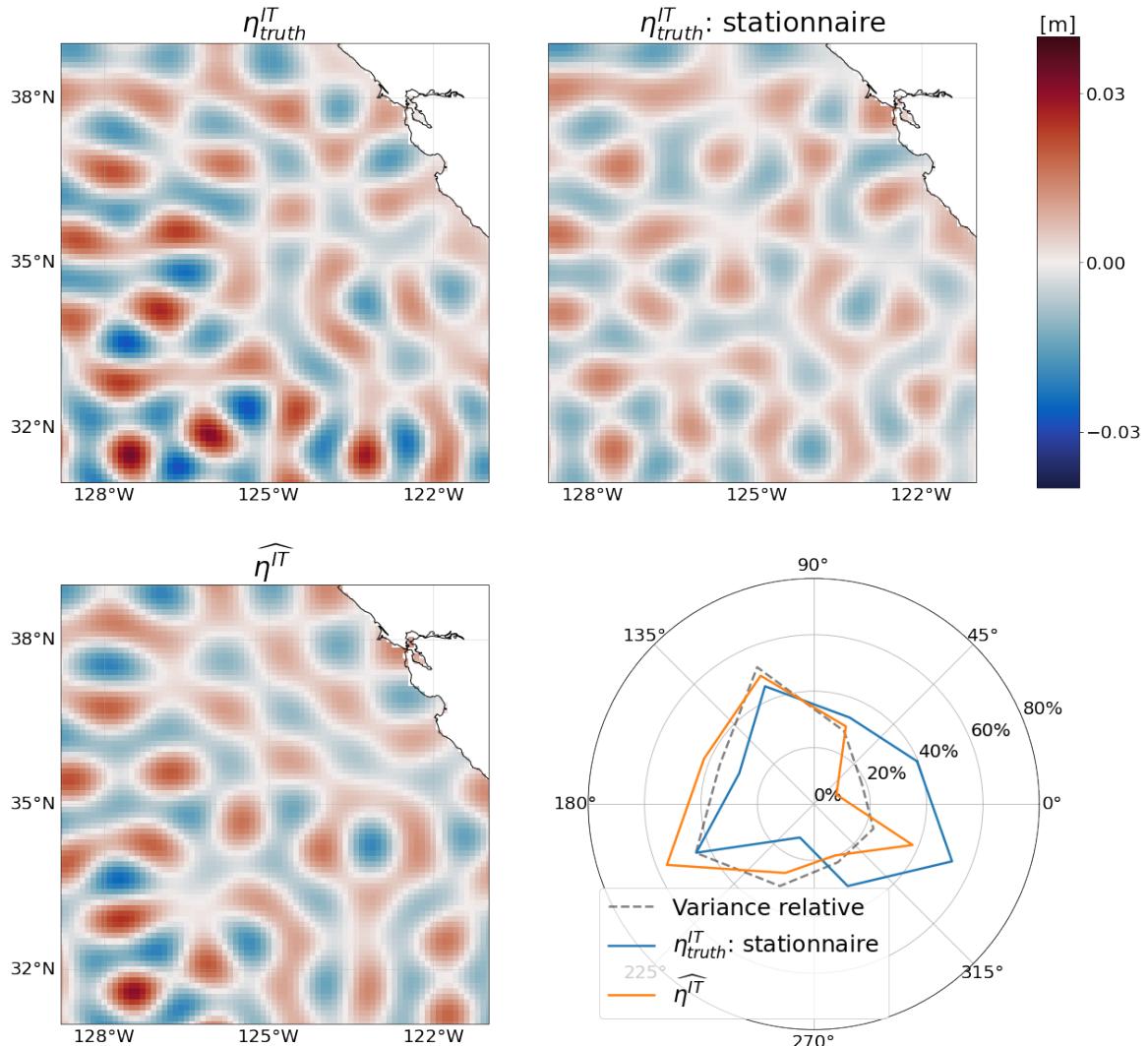


FIGURE 6.8 En haut : champs IT de référence (à gauche) et sa partie stationnaire (à droite). En bas à gauche : champs IT reconstruit par le 4Dvar-QGSW. En bas à droite : graphique présentant la part de variabilité du signal total η^{IT}_{truth} (en %) expliquée par sa composante stationnaire (en bleu) et estimée par le 4Dvar-QGSW (orange) en fonction des directions d'entrée des ondes dans le domaine. Les pointillés gris montrent l'énergie relative de chaque onde plane.

d'utiliser les champs 3D en espace, afin d'extraire la composante stérique du signal pour supprimer la signature des signaux barotropes.

La méthode de minimisation alternée présentée dans le chapitre 5 a montré ses limites lorsqu'on l'applique à ce contexte expérimental. Le problème semble venir du BFN-QG pour lequel il est délicat de prescrire des erreurs d'observation et une ébauche de la dynamique du signal à estimer.

Une nouvelle méthode d'assimilation de données, le 4Dvar-QGSW, a été développée pour simultanément séparer et cartographier les dynamiques BM et IT à partir d'observations altimétriques. Cette méthode hérite d'une grande partie des blocs principaux de la méthode de minimisation alternée. La différence majeure est la formulation variationnelle du problème d'inversion de la dynamique BM. Cela permet l'implémentation d'un 4Dvar qui minimise une seule et unique fonction coût composée d'une partie spécifique à la dynamique BM (modélisée par le modèle QG) et une autre spécifique à la dynamique IT (modélisée par le modèle SW). Cette méthode permet de modéliser les covariances grâce à l'utilisation de bases réduites judicieusement choisies pour chaque dynamique, facilitant ainsi la séparation des signaux équilibrés et de marée interne.

Les résultats, bien que préliminaires, sont encourageants. Le 4Dvar-QGSW parvient à estimer la dynamique équilibrée jusqu'à des échelles spatiales de 90km. De plus, une grande partie de la dynamique du premier mode barocline de la marée interne est correctement estimée et une partie du signal reconstruit est non stationnaire.

De futurs développements sont nécessaires pour exploiter pleinement les capacités du 4Dvar-QGSW à séparer et cartographier les signaux équilibrés et de marée interne à partir des futures données SWOT. Pour l'estimation de la dynamique équilibrée, nous devrons affiner les paramètres de la base réduite afin d'extraire une plus grande part des structures de petites échelles. Pour l'estimation de la dynamique de marée interne, nous devrons améliorer le modèle SW pour mieux prendre en compte les ondes réfléchies sur la côte et générées au sein du domaine. Enfin, le 4Dvar-QGSW devra être testé avec des observations entachées d'erreurs de mesure. Pour cela, il nous faudra probablement modéliser la corrélation des erreurs SWOT au sein du système d'assimilation.

Chapitre 7

Conclusion

7.1 Synthèse

7.1.1 Contexte scientifique

Cette thèse a été motivée par la nécessité d'améliorer l'observation de la dynamique de surface de l'océan à fine échelle, en particulier dans le cadre de l'exploitation des futures données de l'altimètre SWOT. Les cartes de SSH sont indispensables pour étudier une grande variété de processus physiques dans l'océan. Elles sont générées en fusionnant les observations altimétriques sur des grilles globales, régulières en temps et en espace. Aujourd'hui, cette opération de cartographie est réalisée par une interpolation optimale, implémentée de manière opérationnelle au sein du système DUACS. Due à la distribution spatio-temporelle des observations altimétriques conventionnelles, les cartes de SSH actuelles ne permettent pas d'observer les structures dynamiques ayant lieu à des échelles inférieures à 150-200 km aux moyennes latitudes. Or, nous savons, de part des simulations numériques, que la dynamique de l'océan, et plus généralement le climat, sont fortement influencés par des processus physiques qui ont lieu à des échelles plus petites. Pour pallier à ce défaut d'observation, les agences spatiales française (le CNES) et américaine (la NASA) ont conjointement développé un satellite altimétrique révolutionnaire, appelé SWOT (pour *Surface Water Ocean Topography*), qui permettra d'augmenter considérablement la densité de mesure de la SSH avec une précision sans précédent et ainsi accroître la résolution des cartes de SSH.

Comme tout nouveau concept instrumental, la mission SWOT est accompagnée de défis techniques qui doivent être relevés pour bénéficier du retour scientifique de la mission. D'une part, les techniques de cartographie doivent être améliorées pour tirer profit de la haute résolution spatiale des données SWOT tout en compensant sa faible résolution temporelle.

D'autre part, l'augmentation de la résolution des données nous impose de traiter les signaux résultant de processus équilibrés et ondulatoires (notamment la marée interne) séparément pour répondre aux objectifs scientifiques de la mission.

7.1.2 Méthodes

La stratégie commune aux travaux réalisés dans cette thèse a été de combiner les observations altimétriques avec des modèles physiques par assimilation de données. Nous avons utilisé des modèles physiques simples, peu coûteux, ciblant les dynamiques à estimer (équilibrée ou marée interne) et permettant un choix optimal des techniques d'assimilation de données.

Pour la cartographie de la dynamique équilibrée, nous avons développé l'algorithme du BFN-QG. Cet algorithme utilise la dynamique non linéaire Quasi-Geostrophique (QG) pour contraindre le processus de cartographie. Les observations sont assimilées grâce à la technique du Back-and-Forth-Nudging. Cette technique d'assimilation de données est particulièrement adaptée aux modèles simplifiés qui mettent en jeu une seule variable prognostique, comme c'est le cas avec le modèle QG utilisé dans cette thèse. De plus, cette technique est peu coûteuse en temps de calcul et permet de respecter les non linéarités du modèle QG, ce qui est pertinent pour la cartographie des structures de fines échelles.

Pour la cartographie de la dynamique de marée interne, nous avons développé l'algorithme du 4Dvar-SW. Cet algorithme utilise la dynamique linéaire Shallow-Water (SW) pour simuler la propagation des ondes. Dans notre implémentation, les ondes sont générées grâce au paramétrage de frontières ouvertes. Les observations sont assimilées avec la technique du 4Dvar. Le choix du 4Dvar a été motivé par ses performances pour les dynamiques propagatives et ondulatoires et sa formulation qui permet aisément d'estimer les paramètres du modèle (comme les conditions aux frontières).

Un troisième algorithme de cartographie, le 4Dvar-QGSW, a été développé pour estimer simultanément les dynamiques équilibrée et de marée interne. Les deux dynamiques sont, une nouvelle fois, simulées respectivement par les modèles QG et SW. Les observations sont assimilées au sein d'une unique technique d'assimilation de données, basée sur un 4Dvar.

Tout au long de cette thèse, nous avons procédé par étape en développant et testant les méthodes dans des contextes expérimentaux avec des degrés de réalisme croissants. Cela a permis de se concentrer sur les différentes problématiques de manière progressive, pour favoriser l'implémentation technique de chaque méthode.

7.1.3 Résultats

Dans le cas où la dynamique équilibrée domine largement devant la dynamique de marée interne, la méthode du BFN-QG permet d'augmenter considérablement la résolution des cartes de SSH par rapport aux produits opérationnels DUACS. D'une part, une expérience en OSSE (sans dynamique de marée interne) a montré le réel bénéfice du BFN-QG face à DUACS. La résolution des cartes de SSH est grandement améliorée avec une constellation de quatre altimètres nadirs et cette amélioration est accentuée lorsque SWOT est ajouté à la constellation. D'autre part, nous avons vérifié que ce gain en résolution est conservé lorsque la cartographie est réalisée avec des données altimétriques (nadir) réelles. En particulier, le BFN-QG améliore considérablement la précision des courants géostrophiques aux petites échelles spatiales et temporelles.

Lorsque la dynamique de marée interne devient importante, il est nécessaire de la prendre en compte dans le processus de cartographie. Cela a été mis en évidence au sein d'un contexte expérimental idéalisé simulant la propagation du premier mode barocline d'une onde de marée interne à travers un écoulement équilibré. Dans ce contexte, nous avons comparé les performances de cartographie des dynamiques équilibrée et de marée interne lorsque les méthodes du BFN-QG et du 4Dvar-SW sont utilisées de manière indépendante, avec celles obtenues en articulant ces deux méthodes dans un processus de minimisation alternée. Les résultats ont montré un net bénéfice à employer la minimisation alternée pour l'estimation et la séparation des deux dynamiques.

Les performances du 4Dvar-QGSW pour estimer simultanément les dynamiques équilibrée et de marée interne sont très prometteuses. Cette méthode a été testée dans un cadre réaliste où la dynamique ondulatoire est générée par une grande gamme de processus et les observations SWOT sont extraites sur des fauchées en considérant l'orbite réelle de la première phase de la mission. Les résultats préliminaires ont montré que cette méthode est capable de cartographier et séparer une grande part de la variabilité des deux dynamiques. De plus, une partie du signal d'onde de marée interne estimé est non-stationnaire, ce qui est un point central pour l'exploitation des futures données SWOT.

7.2 Perspectives

7.2.1 Traitement des erreurs SWOT

Dans cette thèse, nous avons exclusivement présenté des résultats obtenus avec des données SWOT dépourvues de tout type d'erreur de mesure. Comme détaillé dans l'introduction, ces erreurs sont de deux types. Le premier type, lié à l'instrument KaRIn, engendre une

contamination du signal sous forme de bruit blanc (aucune corrélation spatiale). Le second type, lié au satellite et à l'atmosphère, engendre des erreurs corrélées dans l'espace. Ces erreurs affectent différentes échelles spatiales et leurs intensités sont estimées de manière spectrale. Ces estimations permettent de simuler des observations SWOT entachées d'erreurs réalistes (Gaultier et al., 2015).

Une perspective peu coûteuse en terme de développement méthodologique serait d'évaluer la robustesse des outils de cartographie présentés dans cette thèse (en OSSE) lorsque les observations SWOT sont entachées d'erreurs. Cette étude a été initiée lors du stage de Francisco Amaral que j'ai co-encadré durant cette thèse (c.f. annexe A) où nous avons appliqué le BFN-QG à des observations SWOT entachées d'erreurs KaRIn pour reconstruire la dynamique équilibrée de petite mésoéchelle. Les résultats ont montré que le filtrage de ces erreurs en amont de l'expérience de cartographie (par exemple via la méthode de Gomez-Navarro et al., 2020) peut s'avérer nécessaire pour obtenir de bonnes performances de reconstruction dans des régions de faible variabilité. L'étape suivante de ce travail serait d'évaluer l'impact des erreurs spatialement corrélées sur les performances de reconstruction et d'entrevoir l'intégration d'outils de filtrage comme celui développé par Metref et al. (2020, 2019) dans nos outils de cartographie. Enfin, ces études de sensibilité devraient aussi être menées lorsque la dynamique ondulatoire est prise en compte dans le processus d'assimilation.

De futurs travaux pourraient étudier la faisabilité d'inclure explicitement l'estimation des erreurs spatialement corrélées de SWOT dans le processus d'assimilation de données. Pour cela, la formulation du problème d'assimilation avec un 4Dvar semble mieux adaptée que celle avec la méthode du BFN du fait de l'introduction explicite des covariances des erreurs de l'ébauche (matrice B) et des observations (matrice R) dans la fonction coût. Notons tout d'abord que les erreurs KaRIn (aléatoires) pourraient aisément être prescrites sur la diagonale de la matrice d'observation R. En ce qui concerne les erreurs spatialement corrélées, une stratégie serait d'estimer la signature de ces erreurs au sein du système d'assimilation en ajoutant des variables de contrôle dédiées. Comme la structure spatiale de chaque type d'erreur (par exemple l'erreur de roulis) est connue, il serait pertinent d'exprimer ces nouvelles variables dans une base réduite, permettant ainsi de réduire le nombre de degrés de liberté du problème de minimisation.

7.2.2 Cartographie globale de SSH

Une évolution naturelle de ce travail de thèse est d'adapter et compléter les outils développés pour générer des cartes de SSH à l'échelle globale. En effet, un grand nombre d'études scientifiques et opérationnelles nécessitent l'utilisation de produits d'observation

globaux. Néanmoins, ce passage à l'échelle globale est aujourd'hui limité par plusieurs verrous conceptuels et techniques.

Un premier verrou est l'adaptation de la dynamique dans les régions tropicales, là où l'approximation QG n'est plus valide car la force de Coriolis ne domine plus les forces d'inertie. La variabilité océanique dans ces régions couvre un large spectre de dynamiques linéaires et non linéaires sur une grande gamme d'échelles spatiales. À l'équateur, la dynamique est dominée par des ondes planétaires de grandes longueurs d'onde. En s'écartant de l'équateur, une série de jets et de tourbillons de diverses échelles spatiales (Ubelmann and Fu, 2011) sont générés par les ondes tropicales d'instabilité (Marchesiello et al., 2011), elles mêmes résultant de l'interaction des grands courants équatoriaux. Ces processus lents ont des niveaux d'énergie relativement faibles, laissant alors apparaître clairement la dynamique d'onde interne. Pour cartographier et séparer l'ensemble de ces processus, une idée à explorer serait d'assimiler les observations altimétriques dans un modèle Shallow-Water non linéaire par un 4Dvar. En effet, ce modèle permet d'exciter à la fois la dynamique geostrophique (linéaire/non linéaire) pour de grands nombres de Rossby (faible fréquence de Coriolis) et la dynamique ondulatoire. La séparation des différents processus (ondes tropicales, tourbillons et ondes internes) pourrait être facilitée par l'utilisation de bases réduites adaptées. Par exemple, pour les ondes tropicales, une base réduite adaptée à leur structure anisotrope a été implémentée par Ballarotta et al. (prep).

Un second verrou est la capacité du système d'assimilation à estimer des champs d'onde de marée interne générés et dissipés à l'intérieur du domaine d'étude. En effet, dans cette thèse, nous avons contourné cette difficulté en se focalisant sur des reconstructions régionales où les ondes étaient générées et dissipées à l'extérieur du domaine d'étude. Une approche pour générer et dissiper les ondes à l'intérieur du domaine serait d'étendre la formulation du problème d'assimilation existant à l'estimation de sources et puits d'énergie de marée interne. En terme de modélisation, il faudra inclure des termes de forçage dans les équations du modèle, comme nous l'avons fait avec les frontières ouvertes sur les bords du domaine. En terme d'assimilation, il faudra définir ce que nous contrôlons (position des sites de génération/dissipation, intensité des flux d'énergie entrant/sortant). Un point central sera de limiter le nombre de paramètres de contrôle à estimer. Pour cela, nous pourrions avoir recours à une climatologie des lieux de génération/dissipation de marée interne, qui varie selon les fréquences de marée et les modes spatiaux (de Lavergne et al., 2018).

7.2.3 Assimilation multi-capteurs

Une perspective importante de ce travail de thèse sera d'exploiter les synergies entre la SSH mesurée par altimétrie et d'autres variables de l'océan (température, salinité, courants

etc...) mesurées par satellites et/ou sondes *in situ* pour améliorer la cartographie de la dynamique de l'océan à fine échelle (i.e. petite mésoéchelle, sous-mésoéchelle). En effet, les différents régimes dynamiques qui impactent la circulation à la surface des océans sont observés différemment selon le type de capteur.

La SSH peut être combinée avec des observations satellites à haute résolution de température (SST) et/ou de salinité (SSS) pour cartographier la dynamique équilibrée de fine échelle. En effet, tandis que la SSH donne une vue intégrée de la dynamique à l'intérieur de l'océan caractéristique de la mésoéchelle, les données de SST/SSS renseignent sur la dynamique intensifiée en surface (fronts, filaments) caractéristique de la sous-mésoéchelle. En suivant la stratégie méthodologique qui nous a mené à implémenter la méthode du 4Dvar-QGSW pour estimer simultanément les composantes de la SSH issues des dynamiques équilibrée et ondulatoire, nous pourrions formuler un problème d'inversion visant à estimer simultanément les dynamiques équilibrée intérieure et de surface. Pour cela, une idée serait de décomposer le vecteur de contrôle en une composante due à la dynamique intérieure et une autre composante due à la dynamique de surface (Lapeyre and Klein, 2006). La circulation due à la dynamique intérieure pourrait être estimée en assimilant les observations de SSH dans un modèle QG (comme précédemment) tandis que la circulation due à la dynamique de surface pourrait être estimée en assimilant les observations de SST et SSS (pour dériver la flottabilité de surface) dans un modèle SQG (Lapeyre, 2017). Il est intéressant de noter que cette décomposition de la dynamique équilibrée pourrait également améliorer la séparation avec la dynamique ondulatoire puisque cette dernière a peu d'empreinte sur les données SSS et SST (Ponte et al., 2017).

Les méthodes de cartographie développées dans cette thèse offrent la possibilité d'assimiler des observations de courant. Pour le modèle SW, l'assimilation est quasi-directe car les vitesses sont des variables prognostiques du modèle. Pour le modèle QG, seule la composante geostrophique (déduite de la SSH, unique variable prognostique du modèle) pourra être contrainte par le système d'assimilation. L'assimilation de données issues de *drifters* a un fort potentiel pour la séparation ondes/tourbillons car ces données sont continues dans le temps, ce qui permet de distinguer la variabilité lente (tourbillons) de la variabilité rapide (ondes). Par ailleurs, le développement actuel des missions satellites pour observer les courants de surface (par exemple la mission WaCM; Rodríguez et al., 2019) pourrait motiver des travaux futurs pour étudier l'apport de ces nouvelles données sur la cartographie de la dynamique de surface. En particulier, les méthodes développées dans cette thèse offrent un cadre pertinent pour tester différents scénarios d'échantillonnage (largeur de la fauchée, choix de l'orbite, erreurs instrumentales etc...) pour reconstruire les dynamiques équilibrée et de marée interne.

7.2.4 Reconstruction verticale

Un des objectifs scientifiques de la mission SWOT est d'améliorer l'observation de la circulation océanique en profondeur. Cette problématique n'a pas été abordée dans cette thèse mais les résultats obtenus permettent aujourd'hui de s'y confronter.

Une perspective serait d'exploiter des arguments dynamiques (par exemple basé sur le formalisme eSQG ; Qiu et al., 2016) pour déduire la dynamique en profondeur à partir des cartes de SSH générées par nos méthodes d'assimilation de données. Comme les performances des techniques d'extrapolation verticale sont limitées par la résolution spatiale de la SSH, il serait pertinent d'étudier l'impact du gain en résolution apporté par l'assimilation de données pour reconstruire la dynamique en profondeur.

Une autre perspective serait d'estimer la circulation en profondeur explicitement dans le processus d'assimilation. Une première étape pourrait consister à estimer la variation spatiale de la stratification en ajoutant le rayon de Rossby intervenant dans le modèle QG à une couche et demie dans le vecteur de contrôle. Une seconde étape pourrait implémenter un modèle QG à plusieurs couches pour assimiler les observations altimétriques et ainsi permettre l'estimation des vitesses geostrophiques dans les couches inférieures. Ce travail a été initié dans le cadre du stage d'Eneko Martinez que j'ai co-encadré durant cette thèse (c.f. annexe B) où nous avons implanté la technique du BFN dans un modèle QG à deux couches. Les résultats en OSSE soulèvent des défis de contrôlabilité et d'observabilité dans la couche profonde. Ces défis pourraient en partie être relevés grâce à l'ajout de données *in situ* en profondeur et/ou l'implémentation d'un 4Dvar avec l'utilisation de bases réduites pour réduire le nombre de degré de liberté du problème d'inversion.

Bibliographie

- (1978). The mid-ocean dynamics experiment. *Deep Sea Research*, 25(10) :859–910.
- Abernathay, R. P. and Marshall, J. (2013). Global surface eddy diffusivities derived from satellite altimetry. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 118(2) :901–916.
- Ajayi, A., Le Sommer, J., Chassignet, E., Molines, J.-M., Xu, X., Albert, A., and Cosme, E. (2020). Spatial and temporal variability of the north atlantic eddy field from two kilometric-resolution ocean models. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 125(5) :e2019JC015827. e2019JC015827 10.1029/2019JC015827.
- Arbic, B. K., Wallcraft, A. J., and Metzger, E. J. (2010). Concurrent simulation of the eddying general circulation and tides in a global ocean model. *Ocean Modelling*, 32(3) :175–187. The magic of modelling : A special volume commemorating the contributions of Peter D. Killworth – Part 2.
- Auroux, D. and Blum, J. (2008). A nudging-based data assimilation method : the back and forth nudging (BFN) algorithm. *Nonlinear Process Geophys.*, 15(2) :305–319. Place : Gottingen Publisher : Copernicus Gesellschaft Mbh WOS :000255511000007.
- Ballarotta, M., Ubelmann, C., Pujol, M.-I., Taburet, G., Fournier, F., Legeais, J.-F., Faugère, Y., Delepoule, A., Chelton, D., Dibarboure, G., and Picot, N. (2019). On the resolutions of ocean altimetry maps. *Ocean Science*, 15(4) :1091–1109.
- Ballarotta, M., Ubelmann, C., Rogé, M., Fournier, F., Yannice, F., Gerald, D., Morrow, R., and Picot, N. (2020). Dynamic mapping of along-track ocean altimetry : Performance from real observations. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 37 :1–27.
- Ballarotta, M., Ubelmann, C., Yannice, F., Gerald, D., Morrow, R., and Picot, N. (en prep.). Improved global sea surface height and currents maps from remote sensing and in situ observations.
- Barbot, S., Lyard, F., Tchilibou, M., and Carrere, L. (2021). Background stratification impacts on internal tide generation and abyssal propagation in the western equatorial atlantic and the bay of biscay. *Ocean Science*, 17(6) :1563–1583.
- Bryden, H., Beal, L., and Duncan, L. (2005). Structure and transport of the agulhas current and its temporal variability. *Journal of Oceanography*, 61 :479–492.
- Buongiorno Nardelli, B. (2020). A multi-year time series of observation-based 3d horizontal and vertical quasi-geostrophic global ocean currents. *Earth System Science Data*, 12(3) :1711–1723.

- Carrère, L. and Lyard, F. (2003). Modeling the barotropic response of the global ocean to atmospheric wind and pressure forcing Comparisons with observations. *Geophysical Research Letters*, 30(1275) :4.
- Chassignet, E. P. and Xu, X. (2017). Impact of horizontal resolution ($1/12^\circ$ to $1/50^\circ$) on gulf stream separation, penetration, and variability. *Journal of Physical Oceanography*, 47 :1999–2021.
- Checkley, D. and Barth, J. (2009). Patterns and processes in the californian current system. *Progress In Oceanography*, 83 :49–64.
- Chelton, D., Ries, J. C., Haines, B. J., Fu, L.-L., and Callahan, P. S. (2001). Chapter 1 satellite altimetry. *International Geophysics*, 69.
- Chelton, D., Schlax, and Samelson, R. (2011). Global observations of nonlinear mesoscale eddies. *Progress in Oceanography*, 91.
- Chelton, D. B., deSzoeke, R. A., Schlax, M. G., Naggar, K. E., and Siwertz, N. (1998). Geographical variability of the first baroclinic rossby radius of deformation. *Journal of Physical Oceanography*, 28(3) :433 – 460.
- Danioux, E., Klein, P., and Rivi ?re, P. (2008). Propagation of wind energy into the deep ocean through a fully turbulent mesoscale eddy field. *Journal of Physical Oceanography*, 38(10) :2224 – 2241.
- de Lavergne, C., Falahat, S., Madec, G., Roquet, F., Nylander, J., and Vic, C. (2018). Global maps of internal tide generation and dissipation.
- Dibarbare, G., Pujol, I., Briol, F., Traon, P.-Y., Gilles, L., Picot, N., Mertz, F., and Michaël, A. (2011). Jason-2 in duacs : Updated system description, first tandem results and impact on processing and products. *Marine Geodesy*, 34 :214–241.
- Dibarbare, G. and Ubelmann, C. (2014). Investigating the performance of four empirical cross-calibration methods for the proposed SWOT mission. *Remote Sensing*, 6 :4831–4869.
- Dong, C., McWilliams, J., Liu, Y., and Chen, D. (2014). Global heat and salt transports by eddy movement. *Nature communications*, 5 :3294.
- Ducet, N., Le Traon, P. Y., and Reverdin, G. (2000). Global high-resolution mapping of ocean circulation from topex/poseidon and ers-1 and -2. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 105(C8) :19477–19498.
- Dufau, C., Orsztynowicz, M., Gerald, D., Morrow, R., and Traon, P.-Y. (2016). Mesoscale resolution capability of altimetry : Present and future. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 121.
- Dunphy, M., Ponte, A., Klein, P., and Gentil, S. (2017). Low-mode internal tide propagation in a turbulent eddy field. *Journal of Physical Oceanography*, 47.
- Dussurget, R., Birol, F., Morrow, R., and De Mey-Frémaux, P. (2011). Fine resolution altimetry data for a regional application in the bay of biscay. *Marine Geodesy*, 34 :447–476.

- Escudier, R., BOUFFARD, J., Pascual, A., Poulain, P.-M., and Pujol, M.-I. (2013). Improvement of coastal and mesoscale observation from space : application to the Northwestern Mediterranean Sea. *Geophysical Research Letters*, page /.
- Ferrari, R. and Wunsch, C. (2009). Ocean circulation kinetic energy : Reservoirs, sources, and sinks. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 41(1) :253–282.
- Fu, L.-L., Chelton, D. B., Le Traon, P.-Y., and Morrow, R. (2010). Eddy dynamics from satellite altimetry. *Oceanography*, 23(4) :14–25.
- Fu, L.-L. and Ubelmann, C. (2014). On the transition from profile altimeter to swath altimeter for observing global ocean surface topography. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 31(2) :560 – 568.
- Garrett, C. and Kunze, E. (2007). Internal tide generation in the deep ocean. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 39(1) :57–87.
- Gaspar, P., Ogor, F., Traon, P.-Y., and Zanife, O.-Z. (1994). Estimating the sea state bias of topex and poseidon altimeters from crossover differences. *Journal of Geophysical Research*, 992.
- Gaultier, L., Ubelmann, C., and Fu, L.-L. (2015). The challenge of using future SWOT data for oceanic field reconstruction. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 33 :151113145655001.
- Gomez-Navarro, L., Cosme, E., Sommer, J., Papadakis, N., and Pascual, A. (2020). Development of an image de-noising method in preparation for the surface water and ocean topography satellite mission. *Remote Sensing*, 12 :734.
- Gong, Y., Rayson, M. D., Jones, N. L., and Ivey, G. N. (2021). Directional decomposition of internal tides propagating from multiple generation sites. *Ocean Modelling*, 162 :101801.
- Griffies, S. M., Winton, M., Anderson, W. G., Benson, R., Delworth, T. L., Dufour, C. O., Dunne, J. P., Goddard, P., Morrison, A. K., Rosati, A., Wittenberg, A. T., Yin, J., and Zhang, R. (2015). Impacts on ocean heat from transient mesoscale eddies in a hierarchy of climate models. *Journal of Climate*, 28(3) :952 – 977.
- Guinehut, S., Dhomps, A.-L., Larnicol, G., and Le Traon, P.-Y. (2012). High resolution 3-d temperature and salinity fields derived from in situ and satellite observations. *Ocean Science*, 8(5) :845–857.
- Hastenrath, S. (1982). On meridional heat transports in the world ocean. *Journal of Physical Oceanography*, 12(8) :922 – 927.
- Holland, W. R. (1978). The role of mesoscale eddies in the general circulation of the ocean—numerical experiments using a wind-driven quasi-geostrophic model. *Journal of Physical Oceanography*, 8(3) :363 – 392.
- Klein, P., Isern-Fontanet, J., Lapeyre, G., Roullet, G., Danioux, E., Chapron, B., Le Gentil, S., and Sasaki, H. (2009). Diagnosis of vertical velocities in the upper ocean from high resolution sea surface height. *Geophysical Research Letters*, 36(12).

- Kuhlbrodt, T., Griesel, A., Montoya, M., Levermann, A., Hofmann, M., and Rahmstorf, S. (2007). On the driving processes of the atlantic meridional overturning circulation. *Reviews of Geophysics*, 45(2).
- Kurian, J., Colas, F., Capet, X., McWilliams, J. C., and Chelton, D. B. (2011). Eddy properties in the california current system. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 116(C8).
- Kwon, Y.-O., Alexander, M. A., Bond, N. A., Frankignoul, C., Nakamura, H., Qiu, B., and Thompson, L. A. (2010). Role of the gulf stream and kuroshio–oyashio systems in large-scale atmosphere–ocean interaction : A review. *Journal of Climate*, 23(12) :3249 – 3281.
- Lapeyre, G. (2017). Surface Quasi-Geostrophy. *Fluids*, 2 :7.
- Lapeyre, G. and Klein, P. (2006). Dynamics of the upper oceanic layers in terms of surface quasigeostrophy theory. *Journal of Physical Oceanography*, 36(2) :165 – 176.
- Le Goff, C., Boussidi, B., Mironov, A., Guichoux, Y., Zhen, Y., Tandeo, P., Gueguen, S., and Chapron, B. (2021). Monitoring the greater agulhas current with ais data information. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 126(5) :e2021JC017228. e2021JC017228 2021JC017228.
- Le Guillou, F., Metref, S., Cosme, E., Ubelmann, C., Ballarotta, M., Sommer, J. L., and Verron, J. (2021). Mapping altimetry in the forthcoming SWOT era by back-and-forth nudging a one-layer quasigeostrophic model. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 38(4) :697 – 710.
- Le Traon, P. Y., Faug ?re, Y., Hernandez, F., Dorandeu, J., Mertz, F., and Ablain, M. (2003). Can we merge geosat follow-on with topex/poseidon and ers-2 for an improved description of the ocean circulation ? *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 20(6) :889 – 895.
- Le Traon, P. Y., Klein, P., Hua, B. L., and Dibarboure, G. (2008). Do altimeter wavenumber spectra agree with the interior or surface quasigeostrophic theory ? *Journal of Physical Oceanography*, 38(5) :1137 – 1142.
- Le Traon, P. Y., Nadal, F., and Ducet, N. (1998). An improved mapping method of multisatellite altimeter data. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 15(2) :522 – 534.
- Lévy, M., Ferrari, R., Franks, P. J. S., Martin, A. P., and Rivière, P. (2012). Bringing physics to life at the submesoscale. *Geophysical Research Letters*, 39(14).
- Lyard, F., Lefèvre, F., Letellier, T., and Francis, O. (2006). Modelling the global ocean tides : Modern insights from fes2004. *Ocean Dynamics*, 56 :394–415.
- Lynch-Stieglitz, J. (2017). The atlantic meridional overturning circulation and abrupt climate change. *Annual Review of Marine Science*, 9(1) :83–104. PMID : 27814029.
- Marchesiello, P., Capet, X., Menkes, C., and Kennan, S. (2011). Submesoscale dynamics in tropical instability waves. *Ocean Modelling - OCEAN MODEL*, 39 :31–46.

- Marshall, J., Adcroft, A., Hill, C., Perelman, L., and Heisey, C. (1997). A finite-volume, incompressible navier stokes model for studies of the ocean on parallel computers. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 102(C3) :5753–5766.
- McWilliams, J. C. (2016). Submesoscale currents in the ocean. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 472(2189) :20160117.
- McWilliams, J. C., Colas, F., and Molemaker, M. J. (2009). Cold filamentary intensification and oceanic surface convergence lines. *Geophysical Research Letters*, 36(18).
- Menemenlis, D., Hill, C., Henze, C. E., Wang, J., and Fenty, I. (2021). Southern ocean pre-SWOT level-4 hourly MITgcm LLC4320 native grid 2km oceanographic dataset version 1.0.
- Metref, S., Cosme, E., Le Guillou, F., Le Sommer, J., Brankart, J.-M., and Verron, J. (2020). Wide-swath altimetric satellite data assimilation with correlated-error reduction. *Frontiers in Marine Science*, 6.
- Metref, S., Cosme, E., Le Sommer, J., Poel, N., Brankart, J.-M., Verron, J., and Gómez Navarro, L. (2019). Reduction of Spatially Structured Errors in Wide-Swath Altimetric Satellite Data Using Data Assimilation. *Remote Sensing*.
- Morrow, R., Fu, L.-L., Arduin, F., Benkiran, M., Chapron, B., Cosme, E., d’Ovidio, F., Farrar, J. T., Gille, S. T., Lapeyre, G., Le Traon, P.-Y., Pascual, A., Ponte, A., Qiu, B., Raschle, N., Ubelmann, C., Wang, J., and Zaron, E. D. (2019). Global observations of fine-scale ocean surface topography with the surface water and ocean topography (SWOT) mission. *Frontiers in Marine Science*, 6 :232.
- Mulet, S., Rio, M.-H., Etienne, H., Artana, C., Cancet, M., Gerald, D., Feng, H., Husson, R., Picot, N., Provost, C., and Strub, P. (2021). The new cnes-cls18 global mean dynamic topography.
- Mulet, S., Rio, M.-H., Mignot, A., Guinehut, S., and Morrow, R. (2012). A new estimate of the global 3d geostrophic ocean circulation based on satellite data and in-situ measurements. *Deep-Sea Res. II*, 77–80 :70–81.
- Munk, W. H. (1950). On the wind-driven ocean circulation. *Journal of Atmospheric Sciences*, 7(2) :80 – 93.
- Nash, J. D., Kelly, S. M., Shroyer, E. L., Moum, J. N., and Duda, T. F. (2012). The unpredictable nature of internal tides on continental shelves. *Journal of Physical Oceanography*, 42(11) :1981 – 2000.
- Pascual, A., Pujol, M.-I., Larnicol, G., Le Traon, P.-Y., and Rio, M.-H. (2007). Mesoscale mapping capabilities of multisatellite altimeter missions : First results with real data in the mediterranean sea. *Journal of Marine Systems*, 65(1) :190–211. Marine Environmental Monitoring and Prediction.
- Pierrehumbert, R. T. and Swanson, K. L. (1995). Baroclinic instability. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 27(1) :419–467.

- Polzin, K. L. and Lvov, Y. V. (2011). Toward regional characterizations of the oceanic internal wavefield. *Reviews of Geophysics*, 49(4).
- Ponte, A. and Klein, P. (2013). Reconstruction of the upper ocean 3d dynamics from high-resolution sea surface height. *Ocean Dynamics*, 63.
- Ponte, A., Klein, P., Dunphy, M., and Gentil, S. (2017). Low-mode internal tides and balanced dynamics disentanglement in altimetric observations : Synergy with surface density observations. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 122.
- Ponte, A. L. and Klein, P. (2015). Incoherent signature of internal tides on sea level in idealized numerical simulations. *Geophysical Research Letters*, 42(5) :1520–1526.
- Pujol, M.-I., Faugère, Y., Taburet, G., Dupuy, S., Pelloquin, C., Ablain, M., and Picot, N. (2016). Duacs dt2014 : the new multi-mission altimeter data set reprocessed over 20 years. *Ocean Science*, 12(5) :1067–1090.
- Pujol, M.-I., Schaeffer, P., Faugère, Y., Raynal, M., Dibarbour, G., and Picot, N. (2018). Gauging the improvement of recent mean sea surface models : A new approach for identifying and quantifying their errors. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 123(8) :5889–5911.
- Qiu, B., Chen, S., Klein, P., Sasaki, H., and Sasai, Y. (2014). Seasonal mesoscale and submesoscale eddy variability along the north pacific subtropical countercurrent. *Journal of Physical Oceanography*, 44(12) :3079 – 3098.
- Qiu, B., Chen, S., Klein, P., Torres, H., Wang, J., Fu, L.-L., and Menemenlis, D. (2020). Reconstructing upper-ocean vertical velocity field from sea surface height in the presence of unbalanced motion. *Journal of Physical Oceanography*, 50(1) :55 – 79.
- Qiu, B., Chen, S., Klein, P., Ubelmann, C., Fu, L.-L., and Sasaki, H. (2016). Reconstructability of three-dimensional upper-ocean circulation from SWOT sea surface height measurements. *Journal of Physical Oceanography*, 46(3) :947 – 963.
- Qiu, B., Chen, S., Klein, P., Wang, J., Torres, H., Fu, L.-L., and Menemenlis, D. (2018). Seasonality in transition scale from balanced to unbalanced motions in the world ocean. *Journal of Physical Oceanography*, 48(3) :591 – 605.
- Richards, K. J., Whitt, D. B., Brett, G., Bryan, F. O., Feloy, K., and Long, M. C. (2021). The impact of climate change on ocean submesoscale activity. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 126(5) :e2020JC016750. e2020JC016750 2020JC016750.
- Rocha, C. B., Chereskin, T. K., Gille, S. T., and Menemenlis, D. (2016). Mesoscale to submesoscale wavenumber spectra in drake passage. *Journal of Physical Oceanography*, 46(2) :601 – 620.
- Rocha, C. B., Wagner, G. L., and Young, W. R. (2018). Stimulated generation : extraction of energy from balanced flow by near-inertial waves. *Journal of Fluid Mechanics*, 847 :417–451.
- Rodriguez, E., Fernandez, D., Peral, E., Chen, C., Bleser, J.-W., and Williams, B. (2017). Wide-swath altimetry : A review. pages 71–112.

- Rodríguez, E., Bourassa, M., Chelton, D., Farrar, J. T., Long, D., Perkovic-Martin, D., and Samelson, R. (2019). The winds and currents mission concept. *Frontiers in Marine Science*, 6.
- Roge, M. (2018). *Etudes de cartographie altimétrique pour l'observation de la dynamique méso-échelle dans le contexte SWOT : application à la mer Méditerranée occidentale*. PhD thesis. Thèse de doctorat dirigée par Morrow, Rosemary et Ubelmann, Clément Océan, atmosphère et surfaces continentales Toulouse 3 2018.
- Rogé, M., Morrow, R., and Dencausse, G. (2015). Altimetric lagrangian advection to reconstruct pacific ocean fine-scale surface tracer fields. *Ocean Dynamics*, 65.
- Ruggiero, G. A., Cosme, E., Brankart, J., Sommer, J. L., and Ubelmann, C. (2016). An efficient way to account for observation error correlations in the assimilation of data from the future SWOT high-resolution altimeter mission. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 33 :2755–2768.
- Sasaki, H., Klein, P., Qiu, B., and Sasai, Y. (2014). Impact of oceanic-scale interactions on the seasonal modulation of ocean dynamics by the atmosphere. 5(1) :5636.
- Savage, A. C., Arbic, B. K., Alford, M. H., Ansong, J. K., Farrar, J. T., Menemenlis, D., O'Rourke, A. K., Richman, J. G., Shriner, J. F., Voet, G., Wallcraft, A. J., and Zamudio, L. (2017). Spectral decomposition of internal gravity wave sea surface height in global models. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 122(10) :7803–7821.
- Schubert, R., Gula, J., Greatbatch, R. J., Baschek, B., and Biastoch, A. (2020). The submesoscale kinetic energy cascade : Mesoscale absorption of submesoscale mixed layer eddies and frontal downscale fluxes. *Journal of Physical Oceanography*, 50(9) :2573 – 2589.
- Smith, K. S. and Vallis, G. K. (2001). The scales and equilibration of midocean eddies : Freely evolving flow. *Journal of Physical Oceanography*, 31(2) :554 – 571.
- Stammer, D. (1997). Global characteristics of ocean variability estimated from regional topex/poseidon altimeter measurements. *Journal of Physical Oceanography*, 27(8) :1743 – 1769.
- Stammer, D. and Cazenave, A. (2017). Satellite altimetry over oceans and land surfaces (1st ed.).
- Stauffer, D. R. and Seaman, N. L. (1994). Multiscale four-dimensional data assimilation. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 33(3) :416 – 434.
- Su, Z., Wang, J., Klein, P., Thompson, A. F., and Menemenlis, D. (2018). Ocean submesoscales as a key component of the global heat budget. 9(1) :775.
- Taburet, G., Sanchez-Roman, A., Ballarotta, M., Pujol, M.-I., Legeais, J.-F., Fournier, F., Faugere, Y., and Dibarboure, G. (2019). Duacs dt2018 : 25 years of reprocessed sea level altimetry products. *Ocean Science*, 15(5) :1207–1224.
- Thomas, J. and Daniel, D. (2021). Forward flux and enhanced dissipation of geostrophic balanced energy. *Journal of Fluid Mechanics*, 911 :A60.

- Thomas, L. N., Tandon, A., and Mahadevan, A. (2008). *Submesoscale Processes and Dynamics*, pages 17–38. American Geophysical Union (AGU).
- Thomas, M. and Zhai, X. (2013). Eddy-induced variability of the meridional overturning circulation in a model of the north atlantic. *Geophysical Research Letters*, 40 :2742–2747.
- Torres, H. S., Klein, P., Menemenlis, D., Qiu, B., Su, Z., Wang, J., Chen, S., and Fu, L.-L. (2018). Partitioning ocean motions into balanced motions and internal gravity waves : A modeling study in anticipation of future space missions. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 123(11) :8084–8105.
- Torres, H. S., Klein, P., Siegelman, L., Qiu, B., Chen, S., Ubelmann, C., Wang, J., Menemenlis, D., and Fu, L.-L. (2019). Diagnosing ocean-wave-turbulence interactions from space. *Geophysical Research Letters*, 46(15) :8933–8942.
- Treguier, A. M., Deshayes, J., Le Sommer, J., Lique, C., Madec, G., Penduff, T., Molines, J.-M., Barnier, B., Bourdalle-Badie, R., and Talandier, C. (2014). Meridional transport of salt in the global ocean from an eddy-resolving model. *Ocean Science*, 10(2) :243–255.
- Ubelmann, C., Cornuelle, B., and Fu, L.-L. (2016). Dynamic mapping of along-track ocean altimetry : Method and performance from observing system simulation experiments. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 33(8) :1691 – 1699.
- Ubelmann, C., Dibarboire, G., and Dubois, P. (2018). A cross-spectral approach to measure the error budget of the SWOT altimetry mission over the ocean. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 35(4) :845 – 857.
- Ubelmann, C., Dibarboire, G., Gaultier, L., Ponte, A., Ardhuin, F., Ballarotta, M., and Faugère, Y. (2021). Reconstructing ocean surface current combining altimetry and future spaceborne doppler data. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 126(3) :e2020JC016560. e2020JC016560 2020JC016560.
- Ubelmann, C. and Fu, L.-L. (2011). Vorticity structures in the tropical pacific from a numerical simulation. *Journal of Physical Oceanography*, 41 :1455–1464.
- Ubelmann, C., Klein, P., and Fu, L.-L. (2015). Dynamic interpolation of sea surface height and potential applications for future high-resolution altimetry mapping. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 32(1) :177 – 184.
- Uchida, T., Abernathey, R., and Smith, S. (2017). Seasonality of eddy kinetic energy in an eddy permitting global climate model. *Ocean Modelling*, 118 :41–58.
- Vallis, G. K. (2006). *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K.
- Vergara, O., Morrow, R., Pujol, I., Gerald, D., and Ubelmann, C. (2018). Altimetric wave-number spectra : noise floors and resolution capability.
- Von Storch, H., Langenberg, H., and Feser, F. (2000). A spectral nudging technique for dynamical downscaling purposes. *Monthly Weather Review*, 128 :3664–3673.

- Wang, J., Flierl, G. R., LaCasce, J. H., McClean, J. L., and Mahadevan, A. (2013). Reconstructing the ocean's interior from surface data. *Journal of Physical Oceanography*, 43(8) :1611 – 1626.
- Wang, J., Fu, L.-L., Torres, H. S., Chen, S., Qiu, B., and Menemenlis, D. (2019). On the spatial scales to be resolved by the surface water and ocean topography ka-band radar interferometer. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 36(1) :87 – 99.
- Waugh, D. and Abraham, E. (2008). Stirring in the global surface ocean. *Geophysical Research Letters*, 35.
- Weis, P., Thomas, M., and Sündermann, J. (2008). Broad frequency tidal dynamics simulated by a high-resolution global ocean tide model forced by ephemerides. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 113(C10).
- Welch, P. (1967). The use of fast fourier transform for the estimation of power spectra : A method based on time averaging over short, modified periodograms. *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics*, 15(2) :70–73.
- Whitt, D. B. and Thomas, L. N. (2015). Resonant generation and energetics of wind-forced near-inertial motions in a geostrophic flow. *Journal of Physical Oceanography*, 45(1) :181 – 208.
- Wunsch, C. (1997). The vertical partition of oceanic horizontal kinetic energy. *Journal of Physical Oceanography*, 27(8) :1770 – 1794.
- Wunsch, C. and Ferrari, R. (2004). Vertical mixing, energy, and the general circulation of the oceans. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36(1) :281–314.
- Wunsch, C. and Stammer, D. (1998). Satellite altimetry, the marine geoid, and the oceanic general circulation. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 26(1) :219–253.
- Xu, Y. and Fu, L.-L. (2012). The effects of altimeter instrument noise on the estimation of the wavenumber spectrum of sea surface height. *Journal of Physical Oceanography*, 42(12) :2229 – 2233.
- Yu, X., Ponte, A. L., Lahaye, N., Caspar-Cohen, Z., and Menemenlis, D. (2021). Geostrophy assessment and momentum balance of the global oceans in a tide- and eddy-resolving model. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 126(10) :e2021JC017422. e2021JC017422 2021JC017422.
- Zaron, E. D. (2017). Mapping the nonstationary internal tide with satellite altimetry. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 122(1) :539–554.
- Zaron, E. D. (2019). Baroclinic tidal sea level from exact-repeat mission altimetry. *Journal of Physical Oceanography*.
- Zhao, Z., Alford, M. H., and Girton, J. B. (2012). Mapping low-mode internal tides from multisatellite altimetry. *Oceanography*, issue_volume.
- Zhao, Z., Alford, M. H., Girton, J. B., Rainville, L., and Simmons, H. L. (2016). Global observations of open-ocean mode-1 m2 internal tides. *Journal of Physical Oceanography*, 46(6) :1657 – 1684.

Zhao, Z., Wang, J., Menemenlis, D., Fu, L.-L., Chen, S., and Qiu, B. (2019). Decomposition of the multimodal multidirectional m2 internal tide field. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 36(6) :1157 – 1173.

Annexe A

Rapport de stage de Francisco Amaral

Data Assimilation of realistic SWOT satellite observations

Author: Francisco AMARAL^{a,b}

Supervisor: Prof. Emmanuel COSME^{a,b}

^a Université Grenoble Alpes, Grenoble, France

^b Institut des Géosciences de l'Environnement (IGE), Grenoble, France

KEYWORDS

Data Assimilation

Ocean surface

Satellite altimetry

Quasi-geostrophic model

ABSTRACT

For the past 25 years, satellite altimetry has produced Sea Surface Height (SSH) maps which have allowed oceanographers to study large-scale ocean dynamics ($> 200\text{km}$). However, the small scales of ocean circulation play a key role in a variety of natural phenomena.

In order to research on finer scale ocean dynamics, the future SWOT mission will provide the capability of making measurements of SSH with unprecedented resolution. This will bring challenges to the current data processing techniques and therefore, more advanced techniques are being developed. One such technique is the Back-and-Forth Nudging (BFN) data assimilation method which provides SSH maps consistent with both real-world measurements and the physics of a numerical ocean model. The objective of this project is to test and evaluate different strategies for implementing the BFN method with realistic SWOT observations accounting for both noise and errors.

The results show that, for a low signal-to-noise ratio region, de-noising the SWOT observations is essential for a good performance of BFN. Under de-noised observations, the best strategy was found to be by nudging only the relative vorticity (RV) term. This strategy reconstructed SSH fields with an effective resolution of 60 km and RMSE score of 0.81. For a region with high signal-to-noise ratio, the BFN method appeared robust to noisy observations. Once again, it was found that after de-noising observations, the best strategy was nudging the RV term only. This strategy reconstructed SSH fields with an effective resolution of 89.9 km and RMSE score of 0.86.

Contents

1	Introduction	3
2	The SWOT satellite	4
2.1	State of the art: DUACS	4
2.2	The SWOT Mission	4
2.3	Challenges to DUACS	4
2.4	The SWOT Noise and its De-noising	5
3	The Data Assimilation Method	6
3.1	Back and Forth Nudging Algorithm	6
3.2	The Quasi-geostrophic equations	7
3.3	Nudging operation and effects of noise	8
4	Experimental set-up	8
4.1	Regions and the different effects of noise	9
4.2	Diagnostics for Evaluation	10
5	Results and Discussion	11
6	Conclusion	13
7	Acknowledgements	15
A	Diagnostics	17

1 Introduction

For the past 25 years, it has been possible to quantify and study large-scale ocean dynamics ($> 200\text{km}$) using measurements of Sea Surface Height (SSH) obtained by Nadir altimeter satellites. The measurement of SSH enables the computation of its derivatives and thus, of horizontal pressure gradients. This has enabled the description of the upper ocean dynamics based on geostrophy which is the state of the ocean for which the Coriolis force exactly balances the horizontal pressure gradient force. Based on local SSH measurements, maps of SSH can be derived and prove useful in the study of a variety of natural phenomena such as, ocean dynamics and their impact on the global climate (Morrow and Le Traon 2012).

The current effective resolution of SSH maps is of 150-200 km (Ballarotta et al. 2019) and is not enough to capture mesoscale and sub-mesoscale dynamics. Therefore, the scientific community is "blind" to the processes happening at these smaller scales and their local and global interactions with other systems. On the other hand, it has been suggested that these processes play a key role in a variety of physical phenomena related to the Earth's climate, the ocean's energy and carbon budgets, amongst others (Morrow et al. 2019).

In order to deepen the knowledge base on ocean dynamics, the Surface Water and Ocean Topography (SWOT) mission is being developed. This mission entails a state-of-the-art satellite (namely the SWOT satellite) planned for launch in 2021. This satellite is expected to observe SSH at resolutions of 15-45 km (Wang et al. 2019) and, to exploit this new capability, more advanced data processing techniques are being developed.

An attractive technique to derive SSH maps from SWOT and Nadir measurements is Data Assimilation (DA). DA uses numerical models of the ocean to interpolate the SSH measurements in time and space. The resulting SSH maps are consistent with both the real-world measurements and the physics of the model. A specific DA method is the Back-and-Forth Nudging (BFN) algorithm proposed by Le Guillou et al. 2020. In Le Guillou et al. 2020, simulated SWOT and Nadir observations are fed into a quasi-geostrophic ocean model and the resulting SSH fields seem promising. However, the used SWOT observations are "perfect" i.e. without any account for SWOT measurement noise and errors. The objective of this paper is to test and evaluate the BFN algorithm with realistic SWOT observations accounting for both noise and errors.

The data provided by the SWOT satellite will be contaminated by small-scale random noise and spatially correlated errors. The random noise affects the magnitude of the SSH data in a random fashion making it impossible to retrieve SSH derivatives which are essential to reconstruct current fields. Therefore, the removal of this type of noise prior to the DA process is critical. The work of Gómez-Navarro et al. 2020 brought forth a SWOT-specific random noise filtering technique. This de-noising method effectively removes random noise from SWOT observations and thus, makes it possible to compute SSH derivatives.

As a first experiment in this research, the virgin, noisy SWOT observations will be fed to the BFN. Then, using the de-noising tool, SWOT observations will be de-noised prior to the BFN method. These experiments will be carried out for two distinct regions of the North Atlantic basin with contrasting dynamics and signal-to-noise ratios. The resulting reconstructed fields for both experiments will then be evaluated and compared.

The overall context and issues arising from this mission are put forward in Section 2. Then, in Section 3 the DA method, the ocean model under scope and the implementation of the algorithm are explained. In Section 4 the experimental set-up is clarified. And finally, the results, discussion and conclusions are put forward in Sections 5 and 6.

2 The SWOT satellite

2.1 State of the art: DUACS

At the moment, the most used SSH-derived products are the Developing Use of Altimetry for Climate Studies (DUACS) maps. These maps are created by a relatively simple statistical interpolation in space and time of Nadir satellite data (Dibarboure, Pujol, Briol, et al. 2011).

The resolution of DUACS maps is hindered by the current sensor technology - nadir altimeters measure 1D SSH profiles with a high along-track resolution of 7km but with large gaps between tracks that can reach 200km (Le Guillou et al. 2020). Additionally, it is not possible to observe along-track scales smaller than 50km due to noise. Therefore, the DUACS maps do not resolve scales smaller than 150km. However, given their daily global coverage these have become essential for oceanographic applications. Nevertheless, in order to obtain more insights into mesoscale and submesoscale ocean processes it is of essence to obtain SSH data with a much higher resolution.

2.2 The SWOT Mission

The SWOT mission is the fruit of the collaboration between North American and European oceanographers and hydrologists and other international partners. SWOT is being collectively developed by NASA and the Centre National D'Études Spatiales (CNES) with contributions from the Canadian Space Agency (CSA) and the United Kingdom Space Agency. This satellite mission has been developed to make the first global survey of Earth's surface water, observe the fine details of the ocean's surface topography, and measure how water bodies change over time (*NASA SWOT - Mission* 2020).

The SWOT mission will make unprecedented high-resolution 2D observations of SSH using SAR radar interferometric techniques (Figure 1). This mission is expected to fill the knowledge gap on the dynamics of ocean processes within the 15-150km scale. From an oceanographic perspective, the main objective of SWOT is to quantify ocean surface currents and vertical exchanges below the surface and thus, better understand the role of fine-scale surface processes in the global climate system (MEOM 2017).

2.3 Challenges to DUACS

The SWOT mission will be a disruptive project and will bring challenges to the current data interpolation method of DUACS. The main reasons are due to:

- **Resolution:** The current DUACS' processing method is not designed for high spatial resolution. Furthermore, the spatial and time resolutions of SWOT are incompatible making it very difficult to track submesoscale processes with the current, simple interpolation of DUACS. SWOT will have a typical revisit time of 10 days at mid-latitude, preventing the tracking of fine-scale processes with time scales of one or two days.
- **Noise:** The relatively low signal-to-noise ratio of SWOT will require the development of new and dedicated methods to filter out noise.
- **Amount of data:** The performance of the DUACS algorithm will be highly affected by the steep increase in the amount of data.

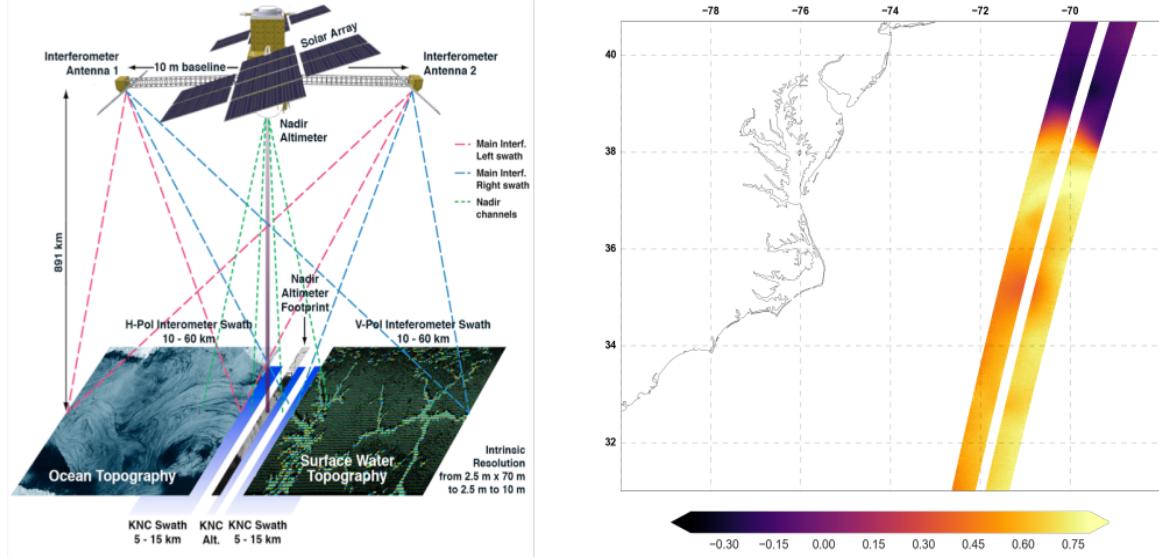


Figure 1: **Left:** Concept of the SWOT mission. A radar source positioned at an end of the baseline alternatively emits towards each swath. Both antennas receive the reflected signals. Ka-band Radar Interferometry (KaRIn) allows to recover SSH measurements at very high resolution. **Right:** Simulation of a SWOT pass over the Gulf Stream region. This simulation is based on a SSH field from the NATL60 North Atlantic simulation at 1/60° resolution and the SWOT simulator (MEOM 2017).

The development of new algorithms to deal with SWOT data is therefore, essential for the success of the SWOT mission. It is no longer possible to simply interpolate the data between two measurements. The submesoscale dynamics are "faster" than the revisit time of the SWOT satellite. Luckily, it is known that High-resolution Numerical Ocean Circulation Models (NOCM) together with Data Assimilation (DA) methods have the potential to solve this and other issues that arise from the implementation of SWOT. In Section 3, the DA method and corresponding NOCM which concern this project will be discussed.

2.4 The SWOT Noise and its De-noising

The data provided by the SWOT satellite will be contaminated by small-scale random noise and spatially correlated errors. The SWOT errors considered in this research are shown in Figure 2. In this Figure strong long-range correlations can be seen for most error types, whereas the Ka-band Radar Interferometer (KaRIn) noise is effectively random.

As can be seen in Figure 2, the spatially correlated errors include satellite roll errors composed of the errors in the knowledge of the spacecraft roll angle and roll control; phase errors introduced by each antenna; baseline dilation errors due to the distortion of the baseline mast (see Figure 1); and the timing error corresponding to a common group delay error of the system. Finally, the random noise is an instrumental noise intrinsic to the KaRIn and is spatially uncorrelated. Further details about the SWOT noise and errors can be found in Esteban-Fernandez 2014 and details about their simulation by the SWOT simulator can be found in Gaultier, Ubelmann, et al. 2016.

The KaRIn noise affects the magnitude of the SSH data in a random fashion making it impossible to retrieve SSH derivatives. Hence, removing this noise from the SWOT

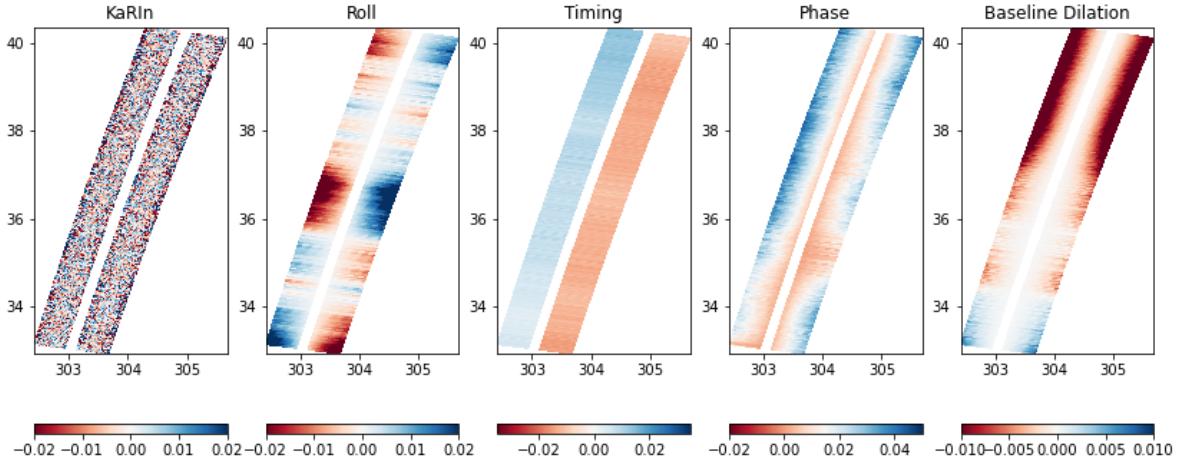


Figure 2: Examples of errors (m) added by the SWOT simulator to the GULFSTREAM region for pass 93 of cycle 01 of the satellite’s orbit and considering a space-time sampling typical of the Science Phase of the mission. In the center of the passes the 20 km Nadir gap can be seen.

observations is of extreme importance. The correct reconstruction of the derivatives enables the computation of physical variables such as the geostrophic velocity and vorticity. Additionally, DA methods, such as the one used in this paper, use the information on the derivatives to mitigate the effect of correlated errors ((Ruggiero, Cosme, Brankart, et al. 2016)).

A new de-noising technique for the SWOT data has been proposed by Gómez-Navarro et al. 2020 where the random small-scale KaRIn noise can be effectively removed. The de-noising model is formulated as a regularized least-square problem with a Tikhonov regularization based on the first-, second-, and third-order derivatives of SSH. This is the chosen method to de-noise SWOT observations in this research and details can be found in Section 4.1.

3 The Data Assimilation Method

3.1 Back and Forth Nudging Algorithm

The nudging technique is a data assimilation method that consists in adding a feedback term to the dynamical equation governing a model. In the presence of real-world observations for a given phenomenon, this term will “push” the model’s state towards the observed, real-world state. This so-called “nudging term” is proportional to the difference between the observation and the state of the model.

As an example, take the following dynamical model:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = M(X, t) \quad (1)$$

Where X is the state variable and M represents the physics of the model. Assuming that real-world observations, Y_{obs} , are available for a time window $[0, T]$ then the model’s state can be nudged towards the observations either forward or backward in time.

Given a known initial state x_0 , the forward nudging can be implemented by the following

system:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = M(X, t) + K(Y_{obs} - X) & \text{for } 0 \leq t \leq T, \\ X(0) = x_0. \end{cases} \quad (2)$$

On the other hand, given a known final condition, x_T , and assuming a fully reversible model, the backward nudging can be implemented as:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = M(X, t) - K(Y_{obs} - X), & \text{for } T \geq t \geq 0, \\ X(T) = x_T. \end{cases} \quad (3)$$

For both these systems, K is the nudging coefficient with the dimension of the inverse of time. K determines the extent to which the model's state is pushed towards the observations - the larger its value the stronger the “push” and the more influence the real-world observation will have.

The Back and Forth Nudging (BFN) algorithm is the combination of these two nudging techniques in an iterative process. This process starts by the forward nudging of the model given a known initial state. Then, the obtained final state is used as an initial state for the backward nudging. After several iterations this algorithm converges towards an optimal trajectory which best fits both the observations and the model's physics (Le Guillou et al. 2020).

In summary, in order to implement a BFN algorithm one needs (i) real-world observations of a given state of a system, (ii) a dynamical model that propagates the state of the system and (iii) a known initial state and boundary conditions. The specifics related to the implementation of the BFN technique in this research can be found in Section 4.

3.2 The Quasi-geostrophic equations

The Quasi-geostrophic (QG) model is a 1.5 layer ocean model that propagates SSH fields without considering mixing nor forcings. The dynamics are dictated by the conservation of Potential Vorticity (PV), q :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + J(\psi, q) = 0 \quad (4)$$

where J is the jacobian operator and ψ is the streamfunction. This function is proportional to SSH as:

$$\psi = \frac{g}{f} SSH \quad (5)$$

where g is the gravitational constant and f the Coriolis parameter. Additionally, the PV relates to the streamfunction, ψ , as:

$$q = \nabla^2 \psi - \frac{1}{L_R^2} \psi \quad (6)$$

where L_R is the Rossby deformation radius. Equation 6 is composed of two terms. The first is the relative vorticity (RV), $\nabla^2 \psi$, which is the vorticity of the fluid as viewed from the rotating frame of the Earth and the second is the vortex stretching (VS), $\frac{1}{L_R^2} \psi$, which

describes the mechanisms of stretching of fluid columns. From here on these terms will be referred to as RV term and VS term, respectively.

3.3 Nudging operation and effects of noise

As can be seen from the presented QG equations, the prognostic variable is q , the potential vorticity (commonly referred to as PV). However, in the context of the SWOT mission SSH measurements are taken and thus, PV is not directly observable. This implies that the nudging operation will take observations of SSH but nudge the PV. Since PV is composed of two terms, three possible nudging strategies arise: nudging both terms and thus, nudging the full PV; nudging only the RV term or nudging only the VS term. The general form of the nudging term is:

$$K(Y_{obs} - X) = -\frac{1}{L_R^2} K_{SSH} \left(\frac{g}{f} SSH_{obs} - \psi \right) + K_{RV} \left[\nabla^2 \left(\frac{g}{f} SSH_{obs} \right) - \nabla^2 \psi \right] \quad (7)$$

where SSH_{obs} is the observed SSH , ψ is the streamfunction of the model, L_R the Rossby radius, g the gravitational constant and f the Coriolis parameter. K_{SSH} and K_{RV} are the nudging coefficients that set the strength of the nudging for each term. In this work, this operation is implemented using the same coefficients as in the work of Le Guillou et al. 2020.

As stated in Section 2.4, the SWOT random measurement noise has repercussions in the computations of derivatives. Therefore, in the presence of such noise it is not possible to perform the nudging operation on the RV term. The opposite happens for the case of spatially correlated SWOT errors. These errors affect mainly the VS term since they generate errors in the magnitude of the signal but not on its dynamics. Thus, under noisy SWOT observations different nudging strategies will yield different results and similarly under de-noised observations. In this work, the main objective is to study the different behaviours of the BFN algorithm under these types of observations.

4 Experimental set-up

Currently, the work of Le Guillou et al. 2020 uses the BFN technique together with a quasi-geostrophic (QG) model (as presented in Section 3) where no irreversible phenomena was considered. As the SWOT satellite has not been deployed yet, this algorithm is fed with simulated SWOT and Nadir altimetry observations based on a "nature run" of the NATL60 model (see Figure 3). This model is a ultra-high resolution simulator of the North Atlantic basin and provides a "pretend" real-world for the SWOT and Nadir simulators to obtain observations from. Then, the QG model is nudged by the BFN algorithm based on the synthetic observations provided by the satellite simulators. Finally, the BFN technique is benchmarked by comparison to the DUACS products and the nature run of NATL60.

As seen in black, in Figure 3, until now the observations have been taken as perfect, i.e. no measurement noise and errors have been taken into account. Hence, the objective of this research project is to build upon the work of Le Guillou et al. 2020 by implementing the BFN algorithm using realistic SWOT observations (both noisy and de-noised) and analyzing its performance. The goal is to answer the following research questions:

1. What is the effect of observation noise in the BFN performance?

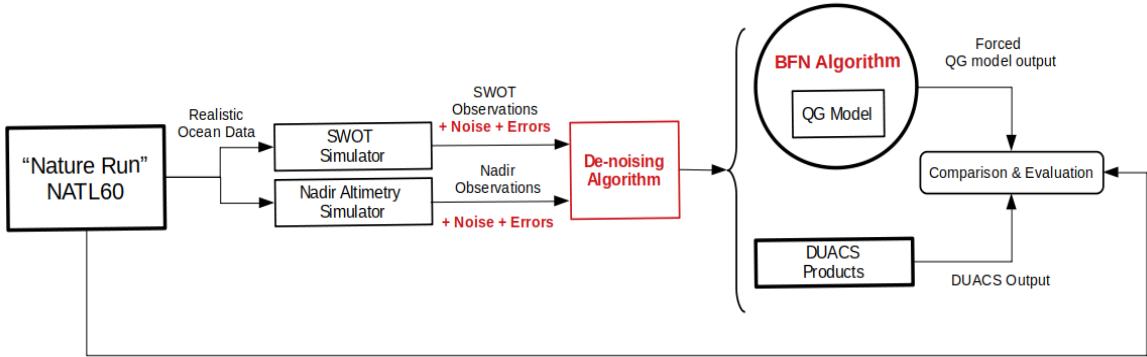


Figure 3: Flow chart of how data is used to test the current approach. It entails a NATL60 model, simulators of SWOT and Nadir altimetry data and a QG model nudged via the BFN technique. In black, the work of Le Guillou et al. 2020 and, in red, the added steps of this work.

2. What is the sensitivity of the BFN algorithm to different nudging strategies (under noisy observations)?
3. What is the effect of the de-noised observations in the BFN performance?
4. What is the sensitivity of the BFN algorithm to different nudging strategies (under de-noised observations)?

The above research questions are answered for two different regions of the North Atlantic basin which will be detailed in the next section.

4.1 Regions and the different effects of noise

The two regions under scope are the same as in Le Guillou et al. 2020 namely, a region containing a part of the Gulf Stream and a region on the Porcupine Abyssal plain, which are from now on referred to as GULFSTREAM and OSMOSIS, respectively.

The reasons behind experimenting on two regions are that these present different dynamics and are characterized by different temporal samplings of SWOT. Hence, the robustness of the BFN method can be shown. Additionally, the SWOT measurement noise will affect these regions to a different extent and the performance of the BFN will thus be region dependent. Further details on the regions can be found in Le Guillou et al. 2020.

As mentioned, the two regions are under different dynamical regimes: the GULFSTREAM is dominated by energetic mesoscale dynamics whereas the OSMOSIS region is less energetic, with small-scale processes that are more perceptible. Since the SWOT observations are infected by small-scale noise their effects will differ between the regions. Figures 4 and 5 show an example of the effect of noise on a SWOT observation for each region. The SWOT pass on the left is the perfect observation as used in the work of Le Guillou et al. 2020 and the one in the center is the observation contaminated by all errors and noise presented in Section 2.4.

As can be seen from Figures 4 and 5, the effect of noise in the GULFSTREAM region is almost imperceptible given that the dynamics of the region are much stronger than the noise. On the other hand, it is clear that for the OSMOSIS region the noise affects the observations to a much greater extent given the less energetic nature of its dynamics.

Additionally, Figures 4 and 5 show a third image (on the right) of the same pass after being de-noised using the method developed by Gómez-Navarro et al. 2020. Note that

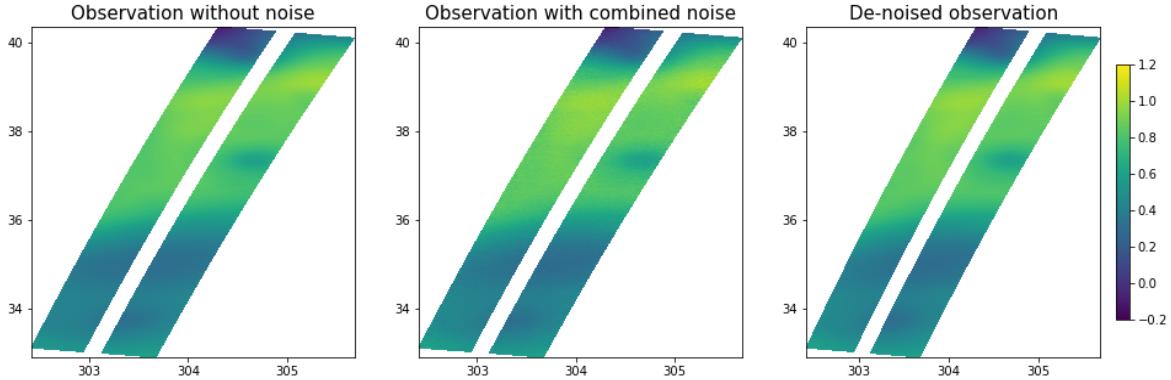


Figure 4: GULFSTREAM Region: Examples of SWOT simulator output of SSH (m) for pass 93 of cycle 01 of the satellite's orbit and considering a space-time sampling typical of the Science Phase of the mission. From left to right: the perfect observation, the realistic observation (with noise) and the observation after being filtered for KaRIn noise. Note the amplitude of measurements of SSH on the right.

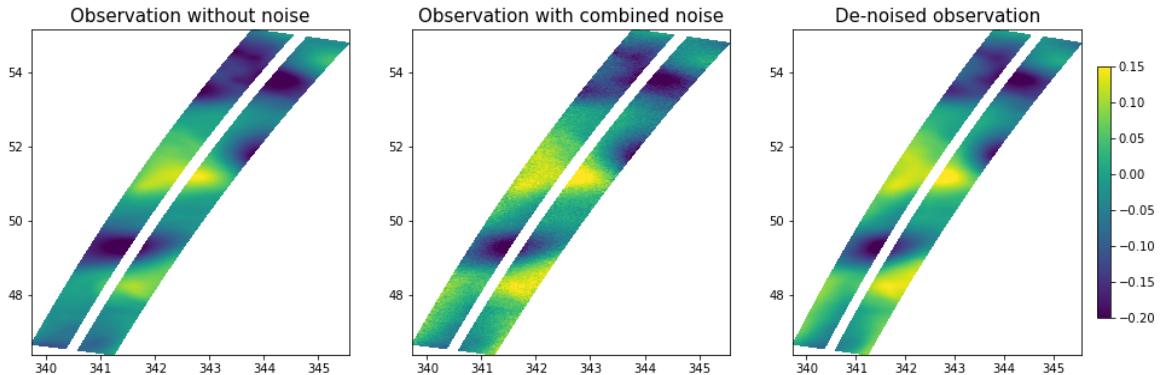


Figure 5: OSMOSIS Region: Same as figure 4 but over the OSMOSIS Region. Example of simulator's pass 07 of cycle 01 of the satellite's orbit. Note the amplitude of measurements of SSH on the right.

the de-noising operation only filters the random noise present in the observations. In this work, the de-noising algorithm was used with the specific parameter $\lambda_2 = 20$ for the GULFSTREAM and $\lambda_2 = 30$ for the OSMOSIS region. Inspection of Figures 4 and 5 shows that the de-noising seems successful in removing the small-scale random noise thus, providing the possibility of implementing the BFN with these de-noised observations.

4.2 Diagnostics for Evaluation

Two evaluation diagnostics are considered which provide metrics on the algorithm's performance.

Root Mean Square Error: The RMSE is computed as a function of time defined by:

$$RMSE(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (SSH(t, i) - SSH^{true}(t, i))^2} \quad (8)$$

where $SSH(t, i)$ and $SSH^{true}(t, i)$ are the values of the reconstructed field and the true field at grid point i and time t , N is the number of grid points within the study domain. For this diagnostic, the relative score $RMSE_S$ is defined as:

$$RMSE_S(t) = 1 - \frac{RMSE(t)}{RMS(SSH^{true})} \quad (9)$$

where RMS is the root mean square function. For a given time point, a score of 1 indicates a perfect reconstruction in terms of $RMSE$ while a score of zero indicates that the $RMSE$ is as large as the RMS of the true field. For this work a single scalar time-mean score of $RMSE_S$, referred to as RMSE score, is also computed and is used to compare the performances of different experiments. The closer to 1 the RMSE score, the more reliable the reconstructed field is.

Wavenumber Power Spectral Density: WPSD provides a spatial-scale dependent metric which is useful to identify the smallest scales resolved by the maps. This metric is computed as in Le Guillou et al. 2020 and in this work the score $WPSD_S$ is presented as a function of wavenumber, and defined by:

$$WPSD_S = 1 - \frac{WPSD(SSH - SSH^{true})}{WPSD(SSH^{true})} \quad (10)$$

Like the RMSE score, for a given wavenumber a score of 1 indicates a perfect reconstruction (the amplitude and phase of the corresponding harmonic is correct) and a score of 0 indicates no phase correlation. For the present work, the effective resolution (ER) of a reconstruction is used for comparison of experiments and is defined by the spatial scale at which $WPSD_S$ is equal to 0.5 (Ballarotta et al. 2019). Like the RMSE score it is also a single scalar. The effective resolution is expressed in kilometers and characterizes the spatial resolution of the reconstructed maps.

5 Results and Discussion

In order to answer the research questions proposed in Section 4 several experiments were made. The results for the OSMOSIS region are presented in Table 1 and for the GULFSTREAM region in Table 2. The results discussed in the following paragraphs will mainly relate to the SSH variable given its importance in the context of oceanography. Nevertheless, the results presented in the tables include the three variables: SSH, Velocity and RV.

The results for the OSMOSIS region (Table 1) show an expected outcome: adding the noisy SWOT observations to the Nadirs already in place degrades the reconstruction of all fields independently of the nudging strategy. Then, when the de-noised SWOT observations are added to the Nadirs the reconstructed fields improve from the Nadirs only scenario. The SSH field is enhanced by 10.2 km in ER while maintaining the RMSE score. Furthermore, this field differs from the best case scenario (i.e. using perfect SWOT observations) by 12.8 km in ER and by 0.06 in RMSE score. A comparison of the diagnostics for the different satellite scenarios and variables is illustrated in Figure 6 and Figure 7 in appendix A.

The performance improvement using the de-noised SWOT measurements is only seen for the relative vorticity (RV) nudging strategy. This is expected given that the spatially correlated errors still infect the observations making the vortex stretching term noisy. The effective resolution of the reconstructed SSH field is 60 km with an RMSE score of 0.81. This result confirms that the RV term can be used within a DA method to mitigate the

Table 1: OSMOSIS Region. Overview of results for the OSMOSIS region. Comparison between performance of nudging strategies (VS, RV, PV) under different observation regimes. The RMSE Score and the Effective Resolution are shown for the reconstructed fields of SSH, Velocity (Vel) and relative vorticity (RV).

Satellites	Nudging Strategy	RMSE score			Effective Resolution		
		SSH	Vel	RV	SSH	Vel	RV
Nadirs	VS	0.81	0.28	0.08	70.2	66.2	74.5
Nadirs + SWOT	PV	0.87	0.44	0.16	47.2	43.8	47.7
	VS	0.4	-0.09	-0.06	214.2	0	201.2
Nadirs + SWOT (with Noise)	RV	0.57	-0.18	-0.32	123.4	0	252.9
	PV	0.4	-0.12	-0.27	215.5	0	203.3
Nadirs + SWOT (De-noised)	VS	0.4	-0.08	-0.05	212.8	0	206.9
	RV	0.81	0.32	0.1	60	59.9	62.6

effect of spatially correlated errors. Additionally, the poor performance of the potential vorticity (PV) nudging strategy suggests that the nudging of the VS term is too strong and/or of the RV term is too weak. Future improvements on the BFN performance using this strategy could be achieved by readjusting the nudging strengths. Additionally, these results indicate that it is essential to de-noise observations in regions with low signal-to-noise ratio.

For the GULFSTREAM region, the results show that the SWOT measurement noise and errors have a small effect on the performance of the BFN across all nudging strategies. In fact, adding the noisy SWOT observations to the Nadirs only scenario slightly improves the reconstruction of the fields. For the SSH field an enhancement of 5.6 km in ER and a drop of 0.01 in RMSE score are seen for the best strategy of nudging RV. However, the noisy SWOT observations do degrade the fields when compared to the best case scenario of Nadirs and perfect SWOT observations. For the SSH field, a difference of 12.3 km in ER and of 0.04 in RMSE score arises. This indicates that for very dynamic regions the signal-to-noise ratio of SWOT is high enough such that it enables the BFN algorithm to still have a relatively good performance.

Under de-noised SWOT observations, the BFN performance is comparable to the noisy experiment for all strategies, where the RV strategy stands out. For this strategy, the reconstructed SSH field gains about 6 km in ER when compared with other strategies for a RMSE score of 0.86. Under the RV strategy, the reconstructed SSH field has an improvement of 11.5 km in ER and 0.01 in RMSE score from the Nadirs only scenario. Additionally, it differs by 6.4 km in ER and 0.02 in RMSE from the best case scenario. The SSH field is reconstructed with an ER of 89.9 km with RMSE score of 0.86. These results show that the random noise from the observations does not affect the VS term since, when de-noised, the performance of the BFN is similar for corresponding strategies.

Table 2: GULFSTREAM Region. Same overview of results as Table 1 but for the GULFSTREAM region.

Satellites	Nudging Strategy	RMSE score			Effective Resolution		
		SSH	Vel	RV	SSH	Vel	RV
Nadirs	VS	0.85	0.48	0.09	101.4	85.2	108.5
Nadirs + SWOT	PV	0.88	0.56	0.13	83.5	71.2	89.2
	VS	0.84	0.48	0.06	96.1	78.3	104
Nadirs + SWOT	RV	0.84	0.46	-0.05	103.2	81.5	109.6
(with Noise)	PV	0.84	0.48	-0.02	95.8	78.1	103.6
	VS	0.84	0.48	0.06	95.6	78.7	103.7
Nadirs + SWOT	RV	0.86	0.52	0.11	89.9	75.8	98.1
(De-noised)	PV	0.84	0.49	0.07	95.2	77.9	102.9

Additionally, as for the OSMOSIS region, the nudging of the PV could be adjusted to give more importance to the RV term and improve the performance of BFN under such strategy.

6 Conclusion

For the less energetic OSMOSIS region, adding noisy SWOT observations to the Nadirs degrades the BFN performance to such extent that it becomes ineffectual. For the realistic case of de-noised SWOT observations, an improvement of 10.2 km in ER while maintaining the RMSE score is seen for the reconstructed SSH field. The effective resolution of the this field is 60 km with an RMSE score of 0.81. This improvement occurs for the relative vorticity (RV) nudging strategy. Furthermore, the poor results of the potential vorticity (PV) nudging strategy indicate that the nudging coefficients should be balanced such that the weight of the RV term is higher in the nudging operation. Finally, these findings indicate that de-noising SWOT observations is critical in regions with low signal-to-noise ratio.

For the energetic GULFSTREAM region, adding noisy SWOT observations to the Nadirs affects the performance of the BFN to a much smaller extent. In fact, when compared to the Nadirs only scenario this improves the reconstruction of the SSH field by 5.4 km in ER whereas the RMSE scores drops by 0.01. Under de-noised SWOT obser-vations the performance is still comparable to the noisy situation for all strategies, where again the RV strategy yields better results. The resulting SSH field has 89.9 km in ER and a RMSE score of 0.86. This translates into an increase by 11.5 km in ER and by 0.01 in RMSE score when compared to the Nadirs only scenario; and a decrease by 6.4 km in ER and 0.02 in RMSE score when compared to the best case scenario. For this region as well, the poor performance under the PV strategy indicates that the role of the RV term

in the nudging operation should be of higher importance.

7 Acknowledgements

I would like to express my appreciation to all those who provided their time and effort to help the completion of this research project. A special gratitude I give to the project supervisor, Professor Emmanuel Cosme, for his insightful guidance and feedback throughout the project. I would also like to acknowledge with my deepest appreciation the crucial role of Florian Le Guillou, who gave me a strong support in the implementation of the BFN algorithm. Without his help this project would have not been possible. Additionally, I would like to thank Sammy Metref and Laura Gómez-Navarro for their help and feedback. Last but not least, many thanks go to Clara Boismorand for proof-reading this report and for offering her constant support.

References

- Ballarotta, Maxime et al. (Aug. 2019). “On the resolutions of ocean altimetry maps”. In: *OcSci* 15.4, pp. 1091–1109. DOI: 10.5194/os-15-1091-2019.
- Dibarboire, G., M.-I. Pujol, F. Briol, et al. (July 2011). “Jason-2 in DUACS: Updated System Description, First Tandem Results and Impact on Processing and Products”. In: *Marine Geodesy* 34.3-4, pp. 214–241. ISSN: 0149-0419. DOI: 10.1080/01490419.2011.584826.
- Esteban-Fernandez, D (2014). “SWOT project mission performance and error budget document; JPL Doc”. In: *Jet Propulsion Laboratory D-79084*.
- Gaultier, Lucile, Clément Ubelmann, et al. (Jan. 2016). *The Challenge of Using Future SWOT Data for Oceanic Field Reconstruction*. [Online; accessed 25. May 2020]. URL: <https://journals.ametsoc.org/doi/10.1175/JTECH-D-15-0160.1>.
- Gómez-Navarro, Laura et al. (Jan. 2020). “Development of an Image De-Noising Method in Preparation for the Surface Water and Ocean Topography Satellite Mission”. In: *Remote Sens.* 12.4, p. 734. ISSN: 2072-4292. DOI: 10.3390/rs12040734.
- Le Guillou, Florian et al. (Apr. 2020). “Mapping Altimetry in the Forthcoming SWOT Era by Back-and-Forth Nudging a One-Layer Quasigeostrophic Model”. In: *J. Atmos. Oceanic Technol.* 38.4, pp. 697–710. ISSN: 0739-0572. DOI: 10.1175/JTECH-D-20-0104.1.
- MEOM (2017). *BOOST-SWOT Project Proposal*.
- Morrow, Rosemary et al. (May 2019). “Global Observations of Fine-Scale Ocean Surface Topography With the Surface Water and Ocean Topography (SWOT) Mission”. In: *Frontiers in Marine Science* 6. ISSN: 2296-7745. DOI: 10.3389/fmars.2019.00232.
- Morrow, Rosemary and Pierre-Yves Le Traon (Oct. 2012). “Recent advances in observing mesoscale ocean dynamics with satellite altimetry”. In: *Adv. Space Res.* 50.8, pp. 1062–1076. ISSN: 0273-1177. DOI: 10.1016/j.asr.2011.09.033.
- NASA SWOT - Mission (Jan. 2020). [Online; accessed 20. Jan. 2020]. URL: <https://swot.jpl.nasa.gov/mission.htm>.
- Ruggiero, Giovanni Abdelnur, Emmanuel Cosme, Jean-Michel Brankart, et al. (Dec. 2016). *An Efficient Way to Account for Observation Error Correlations in the Assimilation of Data from the Future SWOT High-Resolution Altimeter Mission*. [Online; accessed 25. May 2020]. URL: <https://journals.ametsoc.org/doi/full/10.1175/JTECH-D-16-0048.1>.
- Wang, Jinbo et al. (Jan. 2019). “On the Spatial Scales to be Resolved by the Surface Water and Ocean Topography Ka-Band Radar Interferometer”. In: *J. Atmos. Oceanic Technol.* URL: <https://journals.ametsoc.org/doi/10.1175/JTECH-D-18-0119.1>.

A Diagnostics

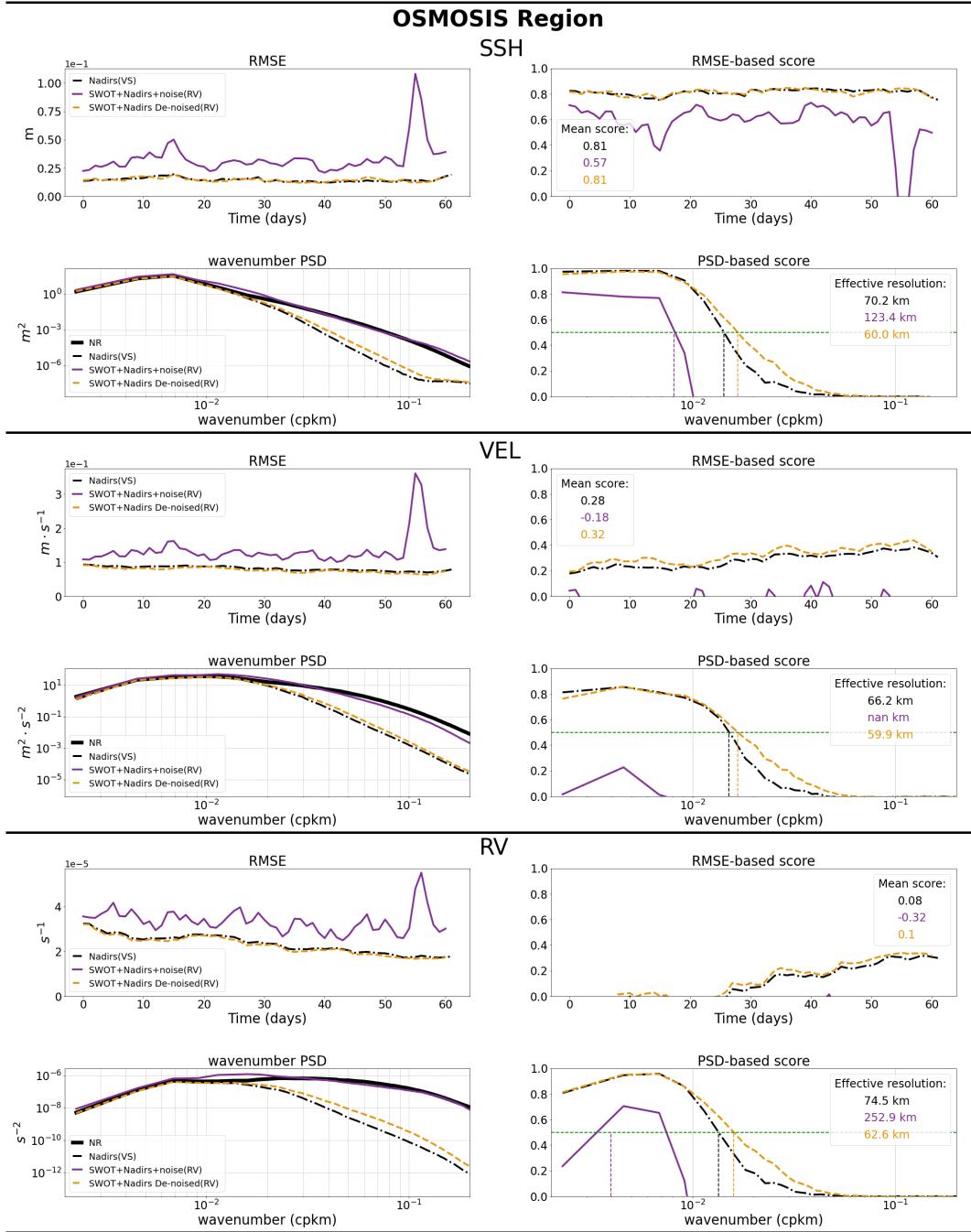


Figure 6: Comparison of BFN performance between the best nudging strategies of the Nadirs only, SWOT+Nadirs with noise and SWOT+Nadirs de-noised regimes. Plots show the time evolution of RMSE and RMSE-based score as well as the WPSD and WPSD based Score as a function of wavenumber. From top to bottom reconstructed fields of: SSH, Velocity (Vel) and Relative Vorticity (RV).

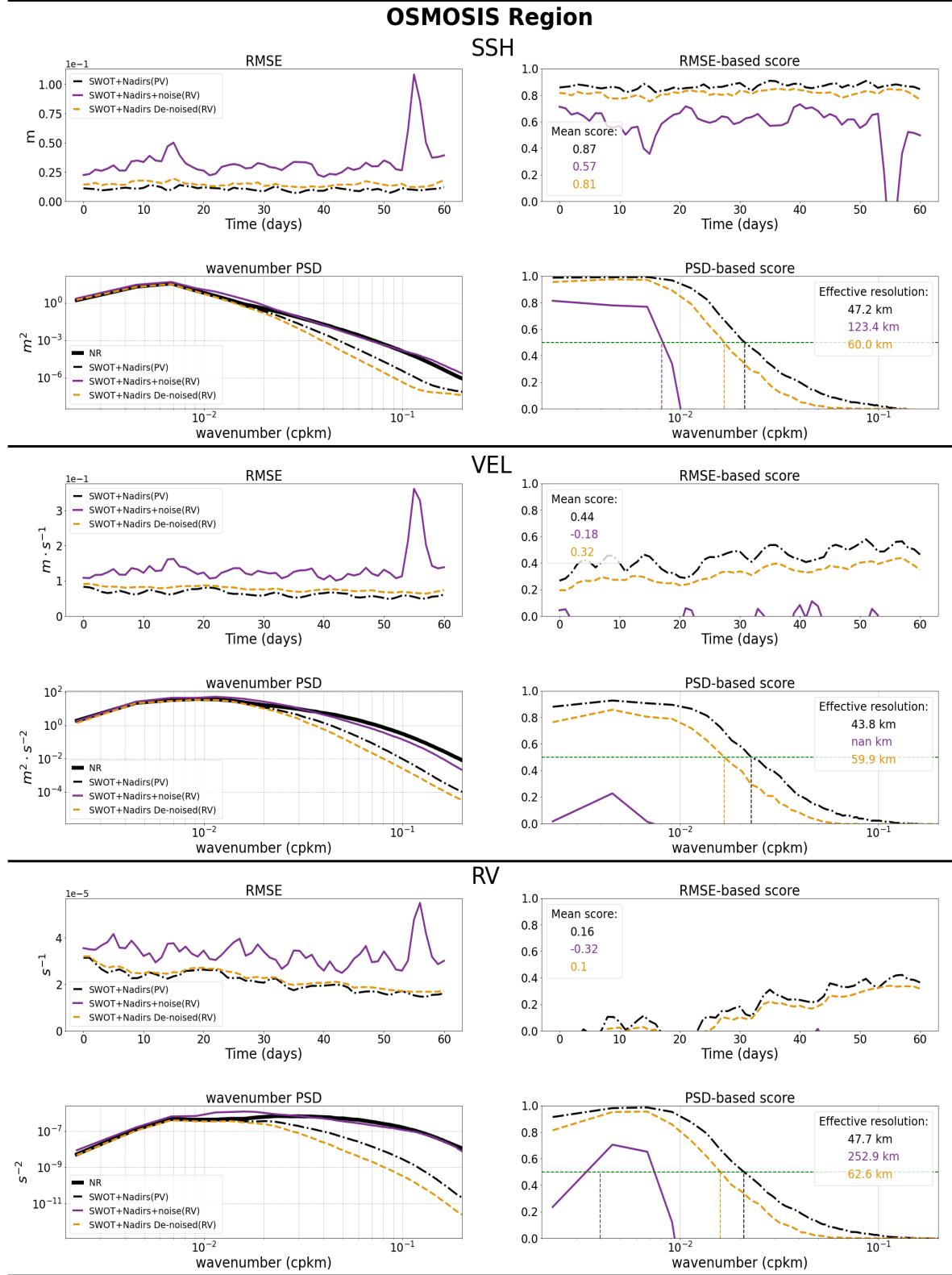


Figure 7: Same as Figure 6 but for the SWOT+Nadirs with perfect observations, SWOT+Nadirs with noise and SWOT+Nadirs de-noised regimes.

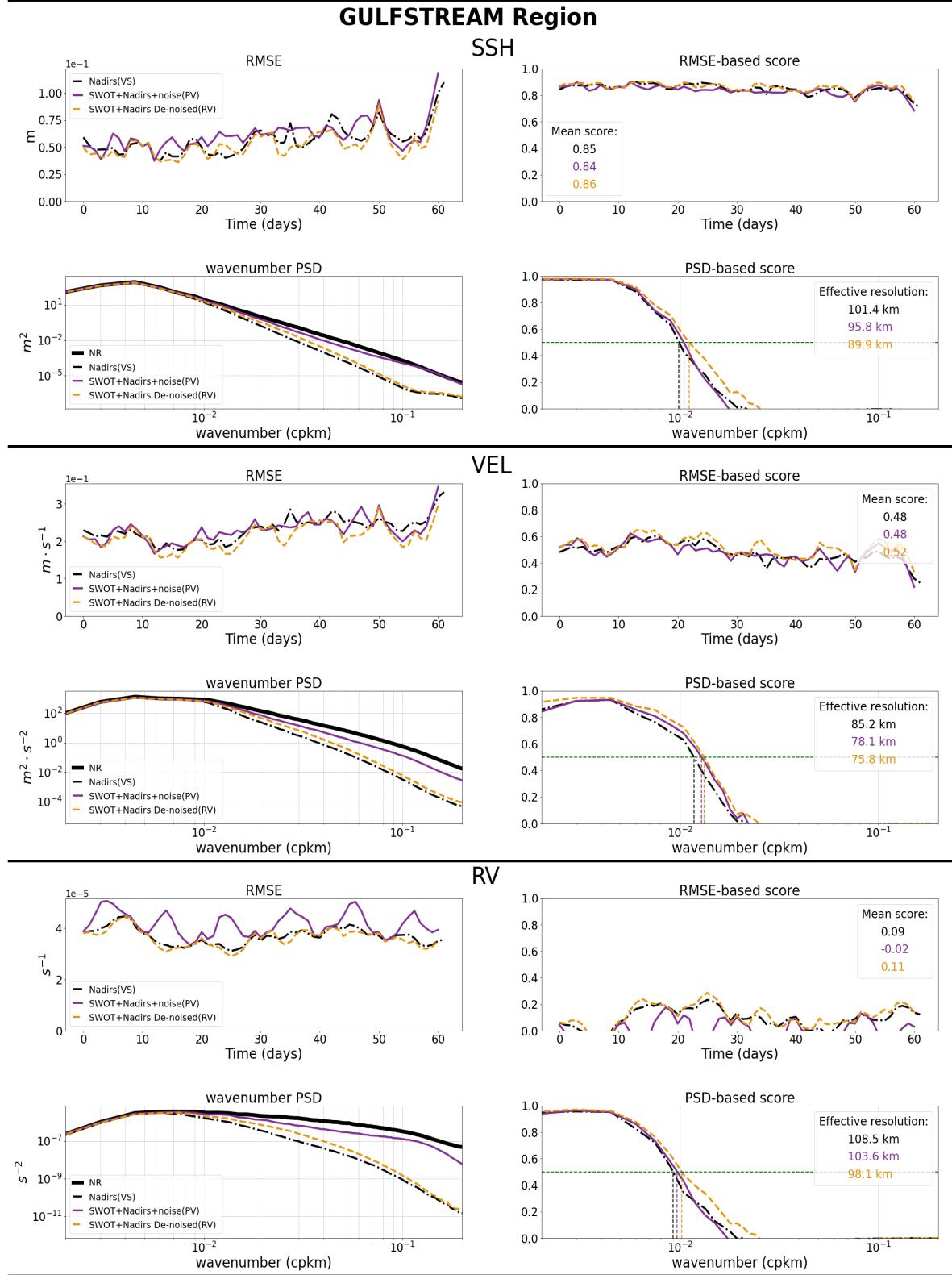


Figure 8: Same as Figure 6 but for the GULFSTREAM Region.

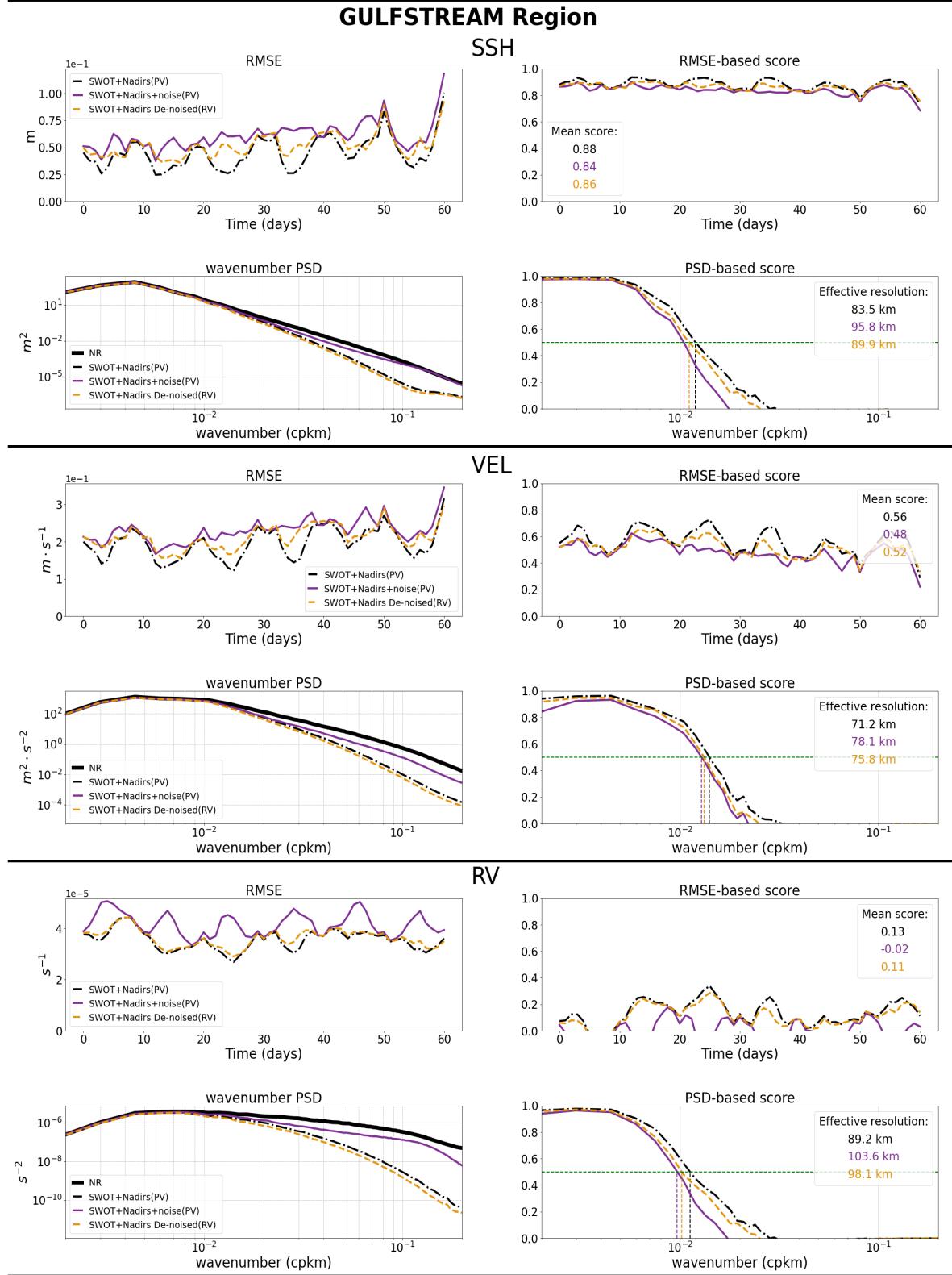


Figure 9: Same as Figure 7 but for the GULFSTREAM Region.

Annexe B

Rapport de stage d'Eneko Martinez



Back and forth nudging SWOT-like observations in a quasi-geostrophic two-layer model

Eneko MARTIN MARTINEZ

July 2020

Master thesis for the M2 program in *Environmental Fluid Mechanics* at *Université Grenoble Alpes*.

The report has been developed as a part of the internship in the *MEOM* group of the *Institut des Géosciences de l'Environnement*.

Advisors: Emmanuel COSME
Bruno DEREMBLE
Florian LE GUILLOU
Sammy METREF

Abstract

The reconstruction of ocean surface data is essential to better understand the dynamics of the ocean. So far, this work has been carried out thanks to altimetry observations from multiple satellites. Sea surface height observations together with geostrophic approximation, allow to reconstruct the surface geostrophic velocity. However, present satellites only capture along-track observations, i.e. one-dimensional. This limits the reconstruction of the ocean dynamics down to the mesoscale.

The launch of the SWOT satellite will improve the reconstruction of sea surface data thanks to its two-dimensional observations. There is today an effort in the scientific community to find the best assimilation method to extract as much information as possible from this new data set. One of the possible methods is the back and forth nudging, which consists of integrating a dynamical model in both directions in time while nudging data until the model converges towards a state close to that of the observations. This method has been applied previously to a quasi-geostrophic reduced gravity ocean model with SWOT's simulated observations. The assimilated data appear to be significantly better with this method rather than traditional interpolation methods.

In the present study, we have applied the same assimilation method but to a quasi-geostrophic two-layer oceanic model. We study the influence of stratification, Ekman bottom friction and topography on the model's ability to reconstruct the original data in Osmosis region. We compare the results obtained for the surface with those of the reduced gravity model. In this case there is no improvement: the reduced gravity model manages to resolve the surface data better. In addition, the reconstruction of the surface data with the two-layer model is optimal when its configuration is close to that of the reduced gravity model.

The model together with the assimilation method has also allowed to reconstruct the deep ocean data. Due to the great variability of the bathymetry of the region under study, the reconstruction of the velocity profile is much better when using topography. Despite not being able to recreate the same pattern of structures of deep ocean's the velocity profile, it has been possible to achieve a result of the same order of magnitude for the modulus of the horizontal speed.

1 | Introduction

The reconstruction of sea surface data (height, temperature, salinity, surface velocity, chlorophyll, etc) is important for many reasons, such as understanding better the ocean dynamics or ocean-atmosphere interactions. Moreover, the surface temperature and currents are also necessary for meteorological prediction, where they are used as a boundary condition of atmospheric models. In this case, the reconstruction has to be as fast and accurate as possible to make the best short-time predictions.

During the last 30 years, the reconstruction of oceanic surface data has improved due to the "revolution" of satellite altimeter missions [[Traon, 2013](#)]. The newest altimeters have a high along-track resolution, close to 7km. However, their information is one-dimensional having large cross-track gap. Moreover, the noise related with their sensors does not allow the detection of scales smaller than between 40–50km [[Dufau et al., 2016](#)].

Until now, most of the studies have used statistical interpolation of SSH data in space and time [[Le Traon et al., 1998](#)] under the DUACS (Developing Use of Altimetry for Climate Studies) project, which was renamed to Data Unification and Altimeter Combination System in 2001. The maps of ocean surface topography distributed using DUACS product are good to study large ocean variability. Even so, these maps are not able to represent the small mesoscale (100km) and submesoscale (10–100km) dynamics .

The launch of SWOT (Surface Water and Ocean Topography) altimeter mission, expected for 2021, will improve the data reconstruction process as it will be able to recover cross-track data as well, i.e. two-dimensional data, see Appendix A. SWOT will make possible to solve smaller scales down to 15–30km in wavelength [[Morrow et al., 2019](#)]. With SWOT it will be possible to observe processes of timescale close to 1 day, but its complete repeat cycle will be close to 21 days and the time between satellite revisits will be of the order of 10 days.

The lack of information due to SWOT's time-period could be a problem if the interpolation method is not the right one. Statistical interpolation is a pure mathematical interpolation method, so the physics are not taken into account during the interpolation. Using statistical interpolation small scale information may be removed if the resolution in time or space is not good enough. That can be solved with dynamical interpolation. This method uses a model to interpolate the data, which means that the physics processes are taken into account as they are reproduced by the model. [Ubelmann et al. \[2014\]](#) showed that the dynamical interpolation could solve smaller scales with future high-resolution missions like SWOT.

Nudging is a popular way to perform dynamical interpolation. It consists in relaxing one or several dynamical variables toward the observations. As an example, [Verron \[1990\]](#) nudged simulated satellite altimeter data in a three-layer model using simulated observation from the first satellite mission. A relatively new and original method is the back and forth nudging (BFN) [[Auroux and Blum, 2008](#)], which consist in performing a series of forward in time and backward in time model integrations with a nudging term over a given integration window. This BFN procedure stops when the state variables converge between two consecutive integrations (back and forth).

The MEOM group of Institut des Géosciences de l'Environnement (IGE), under the BOOST-SWOT project, has been working on the assimilation of SWOT-like simulated observations. They have already implemented the BFN method in a reduced gravity quasi-geostrophic (QG) oceanic

model. The work has shown that the BFN method can improve the results from the DUACS's method in two different regions of the North-Atlantic ocean, Osmosis ($45^{\circ}N - 55^{\circ}N, 20^{\circ}W - 11^{\circ}W$) and Gulfstream ($33^{\circ}N - 43^{\circ}N, 65^{\circ}W - 55^{\circ}W$) [Le Guillou, 2020]. For Osmosis there is an improvement respect to the DUAC's product when solving scales below 150km. There is an effective resolution until 83km length scale dynamics using with BFN method. Although there is a very significant improvement respect to the DUAC's product, the result is not able to reconstruct the submesoscale dynamics.

We are now asking the question if we can extract more information from surface data to reconstruct the 3D dynamics of the ocean. In order to answer this question, we will try to assimilate surface data in a two-layer QG model. The two-layer QG model is able to reproduce the first baroclinic mode, as the reduced gravity model. But, the main difference is that a second layer will be able to develop its dynamics, introducing a new degree of freedom. Therefore, it is possible to expect better results in the dynamics it can solve. We want also to study if it is possible to improve the previous results with the reduced gravity QG model for surface data.

Despite having done experiments in the two regions mentioned above, we will only present the results for Osmosis. The dynamics in the Gulfstream region does not fall in the low Rossby number regime, and consequently the calibration of the two-layer model is more complicated. It has not been possible to find a suitable configuration in the duration of the project.

Although the study has been done with a two-layer configuration, the model has been implemented in such a way that it can be used with more layers. That is why in some sections of this report the expressions are given in general form for a multi-layer QG model, instead of giving the particular case of a two-layer model. In this way, it is hoped that this report can help to produce future studies, both with a two-layer configuration and with three or more layers.

Chapter 2 briefly introduces the quasi-geostrophic physics of the used ocean model. Chapter 3 describes the used methods, introducing the models and the BFN interpolation method. The same chapter also explains how observations are generated and how the two-layer configuration is set. Moreover, the experiment definition is given. Chapter 4 discusses the obtained results. Finally, Chapter 5 summarises the conclusions and proposes possible future research.

This study has also been developed under BOOST-SWOT project in the MEOM group of IGE as an internship for the M2 program in Environmental Fluid Mechanics from Université Grenoble Alpes.

2 | Quasi Geostrophic Ocean Dynamics

2.1 Introduction to quasi geostrophy models

Geophysical fluid dynamics are highly affected by the Coriolis force produced by Earth's rotation. The impact of Coriolis force on the dynamics depends on the timescale of the flow in study. This evaluation is usually done in terms of the Rossby number (Ro), which measures the relative magnitude of inertial terms $O(U^2/L)$ compared to Coriolis parameter $O(f U)$, with f the planetary vorticity, U the characteristic speed and L the length scale of the flow under study. This ratio is

$$Ro = \frac{U}{f L}. \quad (2.1)$$

Ocean dynamics is mostly at $Ro \ll 1$, then some approximations can be done when comparing inertial terms to Coriolis's ones.

As a first approximation, inertial, time-dependent and viscous terms in the Navier-Stokes equations (NS) can be neglected, and supposing small relative changes in the density of the flow (Boussinesq approximation) for the continuity equation. This would lead to the geostrophic flow, which is characterised by the equilibrium between Coriolis and pressure gradient forces. However, this flow is stationary, as the time-derivative is neglected in NS. Therefore, the geostrophic equilibrium is useful to evaluate some characteristic of a flow in a given time. Nonetheless, this approximation is useless for prediction purposes.

If we keep the first order terms in the Taylor expansion, we get the quasi-geostrophic (QG) flow, where the behaviour of the flow is close to the geostrophic equilibrium, but with the possibility to evolve in time. The governing equations of QG flows are usually written as the conservation of the potential vorticity (PV).

The process of going from NS to PV conservation equation is explained in several books, e.g. [Cushman-Roisin and Beckers \[1994\]](#) and [Vallis \[2017\]](#). We will briefly introduce the main equations of PV conservation in the next section to be able to discuss the main characteristics of QG flows later.

2.2 Main equations

As previously mentioned, the QG is based in the conservation of PV (q), which can be written as:

$$\frac{Dq}{Dt} = F + D \quad (2.2)$$

where F and D are the forcing and dissipation therm, such as viscous dissipation ($\nu \nabla^2 q$), biharmonic dissipation ($-\nu_4 \nabla^4 q$), wind shear stress ($\vec{\nabla} \times \vec{\tau}_{z=0}$), bottom friction ($-r \zeta_{z=-H}$).

If we suppose a divergenceless flow in the horizontal plane ($x - y$), which is a result of the geostrophic approximation, we can define a stream function $\psi(t, x, y, z)$ which satisfies:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = v, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = -u \quad (2.3)$$

where u, v are the speeds in the x and y -axis respectively. Then we can rewrite equation (2.2) as

$$\frac{\partial q}{\partial t} + J(\psi, q) = F + D \quad (2.4)$$

with J the Jacobian operator

$$J(a, b) = \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial b}{\partial y} - \frac{\partial a}{\partial y} \frac{\partial b}{\partial x} \quad (2.5)$$

The potential vorticity is defined as

$$q = \nabla^2 \psi + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{f^2}{N^2} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \quad (2.6)$$

where $\zeta = \nabla^2 \psi$ is the relative vorticity (RV), and $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ is the horizontal laplacian. f is the planetary vorticity and the last term is called the vortex stretching.

In the QG approximation the perturbation buoyancy is given by the vertical stream function gradient:

$$b' = f \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (2.7)$$

which can be also used to define the stretching part gradient. The Brunt-Väisälä frequency N is defined as the vertical gradient of the background buoyancy b :

$$N^2 = -\frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z} = \frac{\partial b}{\partial z} \quad (2.8)$$

where ρ is the density profile of the ocean, ρ_0 a reference density value and g the gravity acceleration. N is thus a measure of the ocean stratification. The impact of the stratification is usually evaluated with the Froude number (Fr), which is the ratio between the velocity of the flow and the speed of internal waves

$$Fr = \frac{U}{N H}. \quad (2.9)$$

Most of the ocean is in the subcritical regime $Fr \ll 1$. the smaller Froude number the bigger the stratification will be, as N will be bigger. Strongly stratified system is more stable, as the contribution of the stretching part in the PV will be smaller.

Therefore, it is important to take into account the extratification when calibrating a QG model. Density is directly related to the salinity and temperature of the ocean, through the equation of state. These two variables play an essential role in the dynamics of the ocean. The existence of the thermocline, a layer that extends from approximately 200m depth to 1000m depth, where the temperature gradient is maximum, causes a division of the ocean in two. The upper part of the ocean with the lowest density and fast dynamics, also known as the mixed-layer because it is a fairly uniform layer in temperature and salinity. And the lower part, which is denser and has slower dynamics.

For this reason it is common to use a two-layer discretization. It is important to take into account the thickness of the mixed layer when discretizing the model. Bearing in mind that the mixed-

layer varies its thickness seasonally, due to solar radiation. That is why an ideal configuration for a season may not be ideal for another, and this configuration will also depend on the region under study [Flierl, 1978].

2.3 Energetics

In QG approximation the vertical speed w is neglected compared to the horizontal components (u, v) . Then for small Ro , the kinetic energy is approximately the horizontal squared speed, $u^2 + v^2 = |\nabla \psi|^2$, where ∇ is the horizontal gradient operator, $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right)$. Using the regular definition of kinetic energy (KE) we get:

$$\text{KE} = \frac{1}{2} \rho_0 \iiint |\nabla \psi|^2 dx dy dz \quad (2.10)$$

In QG the relevant potential energy (PE) is the fraction of PE that is available to drive the flow, also called available potential energy (APE). The APE is defined as the PE minus the PE at rest. For a continuously stratified QG approximation it is given by the following expression:

$$\text{APE} = \frac{1}{2} \rho_0 \iiint \frac{b'^2}{N^2} dx dy dz = \frac{1}{2} \rho_0 \iiint \frac{f_0^2}{N^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 dx dy dz \quad (2.11)$$

Multiplying the equation of evolution of PV (2.4), using its definition from equation (2.6) and integrating the result in the whole domain, the total energy evolution of the system can be derived. In the absence of external forces or energy loss/input in the boundaries, this energy will be conserved and can be split into the KE and APE.

2.4 Interaction between layers

Following the conservation of PV given by equation (2.2) and using the definition of PV in equation (2.6), we can see that the local variation of RV must be compensated by the stretching contribution to PV. This means that the vertical gradient of the stream function ψ must change. This variation give a new horizontal speed profile, not only in the given depth but also in the adjacent ones due to the vertical derivative. Therefore, the speed in different layers varies due to the contribution of stretching part in the PV conservation.

The APE, see equation (2.11), is the energy that is stored due to the vertical gradient of ψ , in other words, it is the energy stored due to the perturbation buoyancy. As soon as a layer changes its dynamics respect to the adjoining ones, APE will be stored. At some point, the stored energy will create instabilities, which will produce eddies in original and the adjacent layers. This instability is commonly known as the baroclinic instability.

The baroclinic instability is a feature primarily described by QG dynamics. It can be seen as a result of several modes of vertical waves, which are a result of an eigenvalue problem, as it is explained by Chelton et al. [1998]. The generated eddies will scale with the baroclinic Rossby radius of deformation, which value is given by solving the stated eigenvalue problem. Using a two-layer model allows representing the baroclinic instability given by the first baroclinic mode.

3 | Methods

The study is based in the Observing System Simulation Experiment (OSSE) framework. A "true state" is defined, which will be used to generate the observations and validate the results, as it has been done before in many reference studies, e.g. [Verron, 1990] or [Le Guillou, 2020].

NATL60¹ configuration of NEMO² is used to define the true state. The NATL60 data has a total of 300 depth levels with a horizontal resolution of 1/60°, about 1.2km resolution in the Osmosis region. This data is able to represent oceanic processes down to a scale of 10–15km [Ajayi et al., 2020].

NATL60 data is used for different purposes. SSH values are used both to simulate SWOT observations and to validate assimilation results. The 3D temperature and salinity data at the start of the experiment is used to compute the mean vertical density profile in the region. The 3D meridional and zonal velocity data is used to validate the dynamics generated in the second layer of the multi-layer model.

The SWOT-like observations are extracted using the SWOT simulator developed by NASA [Gaultier et al., 2015]. The used configuration produces a 120km wide swaths with a 20km gap in the middle. They are considered perfect observations, meaning that the possible noise in the real observations is not considered.

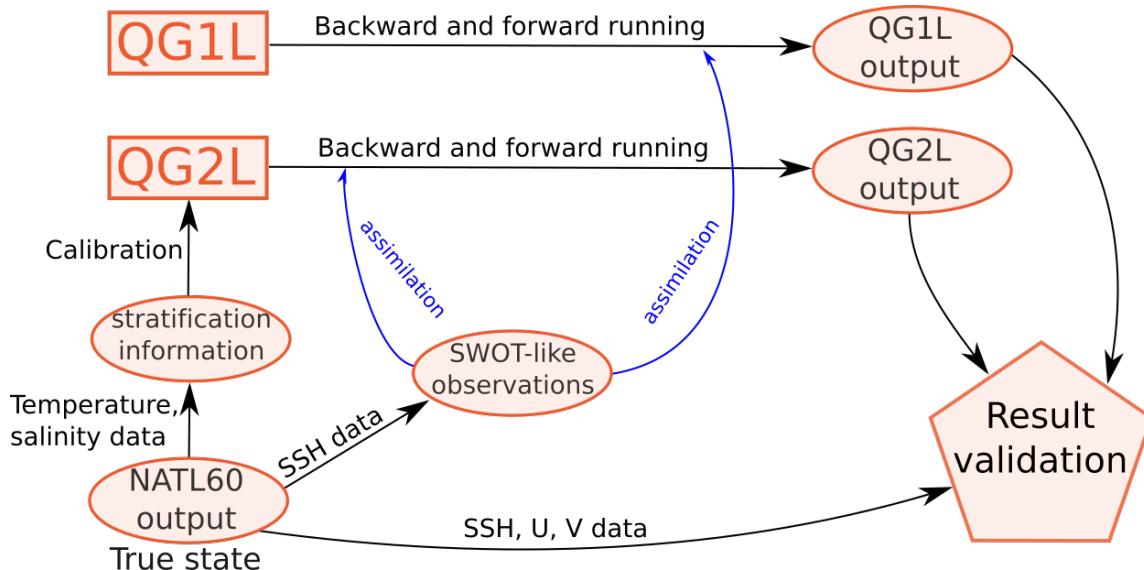


Figure 3.1: Sketch of the used methods. The true state is defined from NATL60, which is used to calibrate the 2-layer model (QG2L) and to generate the satellite observations. 1.5-layer (QG1L) and QG2L models are ran backward and forward while assimilating the observations with the BFN method. Finally QG1l and QG2L results are compared and validated with NATL60 data.

In order to check if there are any improvements over the previously used model, the experiments are done with both the two-layer model and the one and a half layer model used by Le Guillou [2020]. The used numerical models are introduced in section 3.1. The BFN method, explained

¹NATL60 configuration by MEOM: <https://meom-group.github.io/swot-natl60/virtual-ocean.html>

²Nucleus for European Modelling of the Ocean (NEMO): <https://www.nemo-ocean.eu>

in section 3.2, is applied with this models using simulated observations from the true state. The calibration of the 2-layer model is explained in section 3.4. The diagnostic used for experiment validation are given in section 3.6. This processes are summarised in Figure 3.1.

3.1 Numerical models

We now propose a discretized form of the QG equations from section 2.2. We get a multi-layer model of the QG flow. In a multi-layer model of n layers both $\psi(t, x, y, z)$ and $q(t, x, y, z)$ have to be vertically discretized as $\psi_k(t, x, y)$ and $q_k(t, x, y)$, where k represent the layer number starting from the surface. Therefore, equation (2.4) can be expressed as:

$$\frac{\partial q_k}{\partial t} + J(\psi_k, q_k) = F_k + D_k, \quad \forall k \in \{1, \dots, n\} \quad (3.1)$$

Discretizing the potential vorticity from equation (2.6) we have:

$$q_k = \begin{cases} \nabla^2 \psi_1 + \frac{f^2}{\Delta h_1} \frac{1}{N_{1+1/2}^2} \frac{\psi_2 - \psi_1}{\Delta h_{1+1/2}} & \text{if } k = 1 \\ \nabla^2 \psi_k + \frac{f^2}{\Delta h_k} \left(\frac{1}{N_{k+1/2}^2} \frac{\psi_{k+1} - \psi_k}{\Delta h_{k+1/2}} - \frac{1}{N_{k-1/2}^2} \frac{\psi_k - \psi_{k-1}}{\Delta h_{k-1/2}} \right) & \text{if } 1 < k < n \\ \nabla^2 \psi_n - \frac{f^2}{\Delta h_n} \frac{1}{N_{n-1/2}^2} \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta h_{n-1/2}} & \text{if } k = n \end{cases} \quad (3.2)$$

where Δh_k is the thickness of the k -th layer, $\Delta h_{k+1/2} = 1/2 (\Delta h_k + \Delta h_{k+1})$ and $N_{k+1/2}$ is the Brunt-Väisälä frequency in the interface between the layers k and $k + 1$.

In the case of a multi-layer model the SSH is directly related to the stream function of the first layer.

$$\psi_1 = \frac{g}{f} \text{SSH} \quad (3.3)$$

this relation is directly derived from the geostrophic equilibrium.

3.1.1 1.5-layer model

The definition of one and a half layer model, also called reduced gravity model, can be done from a 2-layer model using previous equations, with a lower layer at rest: $\psi_2 = 0$ or $\Delta h_2 \gg \Delta h_1$. This configuration is using an infinitely deep second layer where there will be no dynamics, as we need an infinite amount of energy to move it if we initialise it at rest.

The used model has no dissipation or forcing terms. Consequently, the one layer model can be written with the following equations:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -J(\psi, q) \quad (3.4)$$

$$q = \nabla^2 \psi - \frac{1}{Rd^2} \psi \quad (3.5)$$

$$\psi = \frac{g}{f} \text{SSH} \quad (3.6)$$

where Rd will be the first Rossby radius of deformation. The definition can be easily derived using the relation between Rd and $N_{1+1/2}$ derived in Appendix C when we neglect $(\Delta h_1)^2$ against $\Delta h_1 \Delta h_2$ in the definition of q_1 of equation (3.2).

A simpler derivation of the one layer model can be done defining the potential vorticity with the surface height, instead of using the derivative of ψ , as it is done by [Vallis \[2017\]](#) in section 5.3.

3.1.2 Multi-layer model

We use the Multiple Scale Quasy-Geostrophic model (MSQG)³. This model is based on Basilisk⁴ code and it is written in C. The model can be used with viscosity, biharmonic viscosity, β -plane approximation, Ekman bottom friction, wind-stress and topography. However, only viscosity, Ekman bottom friction and topography will be used in this study.

As previously mentioned, the implementation has been done in such a way that the model can be run with any number of layers (minimum 2), but we will focus on a 2-layer configuration. Therefore, the equations (3.1)-(3.2) must be simplified for $n = 2$. The Ekman bottom friction contribution applies only for the bottom layer, as a factor $-r$ multiplying the RV, $-r \nabla^2 \psi_2$. The viscous dissipation applies in each layer and is proportional to the laplacian of the PV, $v \nabla^2 q_k$.

Appendix D gives more information about the model implementation in the already existing library of the project.

3.2 The Back and Forth Nudging

The back and forth nudging (BFN) was introduced by [Auroux and Blum \[2005\]](#) and after used first in a quasi-geostrophic three layer model by [Auroux and Blum \[2008\]](#). A regular nudging assimilation method would replace the value given from the model, also called forecast, by a weighted sum between the forecast and an observation, and then continue running the model. In the case of the BFN, this process is computed until arriving to a given time, also known as the temporal BFN window size. After that, a backward model integration is computed with nudging, using as initial state the result of the forward nudging. The process is repeated several times, or loops, until the model has converged to a solution that best represents the dynamics compatible with the observations.

Let's suppose we have a model written in the following way:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\vec{x}, t) \quad (3.7)$$

Where \mathcal{M} the model, $\vec{x} \in X$ the vector of the model variables, t the time and $\vec{y} \in Y$ as the vector of the observed variables. Let's denote f the function that projects the observed variables on the variables used by the model, $f(Y) \rightarrow X$. Therefore, $f(\vec{y}) - \vec{x}$ is well defined. We introduce the nudging matrix K , as the matrix that projects $f(\vec{y}) - \vec{x}$ in the model output variables, $\frac{\vec{x}}{\Delta t}$, where Δt is the model time step. In the easiest case, where we suppose no direct correlation between the

³MSQG GitHub repository from Bruno Deremble: <https://github.com/bderemb1/msom>

⁴Basilisk project website: <http://basilisk.fr>

\vec{x} variables, K can be defined as a diagonal matrix. In this case the units of the non-zero values are inverse of time units. Each value must be positive and smaller than $1/\Delta t$, so the model trajectory will not be highly affected by the nudging. Otherwise, the assimilation could produce non-valid solutions forcing the model to diverge and crash.

Using an initial condition or taking the final result of a previous backward nudging as \vec{x}_0 , the forward nudging will be computed as:

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\vec{x}, t) + K(f(\vec{y}) - \vec{x}), & 0 \leq t \leq T \\ \vec{x}(0) = \vec{x}_0 \end{cases} \quad (3.8)$$

Using $\vec{x}(T)$ as \vec{x}_T the final result of the forward nudging, the backward nudging will be computed as:

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\vec{x}, t) - K(f(\vec{y}) - \vec{x}), & T \geq t \geq 0 \\ \vec{x}(T) = \vec{x}_T \end{cases} \quad (3.9)$$

3.2.1 Practical implementation of the nudging

In the case of having one variable system or taking the assimilation independently in the variables using a diagonal K matrix, we can use scalar k as a nudging coefficient for each variable, what let us compute the nudging in each variable independently. However, doing the nudging each model time step would be really slow. In order to make the process faster we run the model without nudging during a fixed T_{ass} assimilation period, which is much bigger than the time step Δt used by the model. T_{ass} is also smaller than the BFN time window and much smaller than the characteristic time of the processes we want to solve. If we already have the assimilated value x_n^a , we will perform time steps to compute the forecast with the model $x_{n+1}^f, x_{n+2}^f \dots$ until we arrive to $x_{n+T_{\text{ass}}/\Delta t}^f$. Next, we compute the nudging in the variable x as:

$$x_{n+T_{\text{ass}}/\Delta t}^a = x_{n+T_{\text{ass}}/\Delta t}^f + \{k [f(y) - x] (n \Delta t + T_{\text{ass}})\}^{\text{proj}} \quad (3.10)$$

where $\{k [f(y) - x] (n \Delta t + T_{\text{ass}})\}^{\text{proj}}$ stands for the projection of the difference between the observation and the model state multiplying it by the nudging coefficient at time $n \Delta t + T_{\text{ass}}$. This process uses a time and space factor to include the spatial and time correlation of the oceanic data at small length and time scales. The projection of the nudging coefficient is explained in the next section, this projection must be therefore multiplied at each point by the corresponding difference between the observations and model state for the corresponding times.

3.2.2 Computation of the nudging coefficient

The nudging coefficient k must reflect the influence of the distance to the observations and the time delay, assuming that in the ocean data we have both spatial and time correlation. We compute the nudging coefficient using Gaspari-Cohn function [Gaspari and Cohn, 1998]:

$$k(x, y, t) = k_0 e^{-\left(\frac{t-t_{\text{obs}}}{\tau}\right)^2} e^{-2\left(\frac{d_{\min}(x, y)}{D}\right)^2} \quad (3.11)$$

where τ and D are the timescale and distance scale used, the nudging coefficient is set to 0 for times and distances greater than 2τ and $2D$ respectively. $t - t_{\text{obs}}$ represent the time delay from the observation, and $d_{\min}(x, y)$ is the minimum distance from the observation to the pixel where we are assimilating data. Figure 3.2 shows the spatial projection of some observations and their corresponding nondimensional nudging spatial projection.

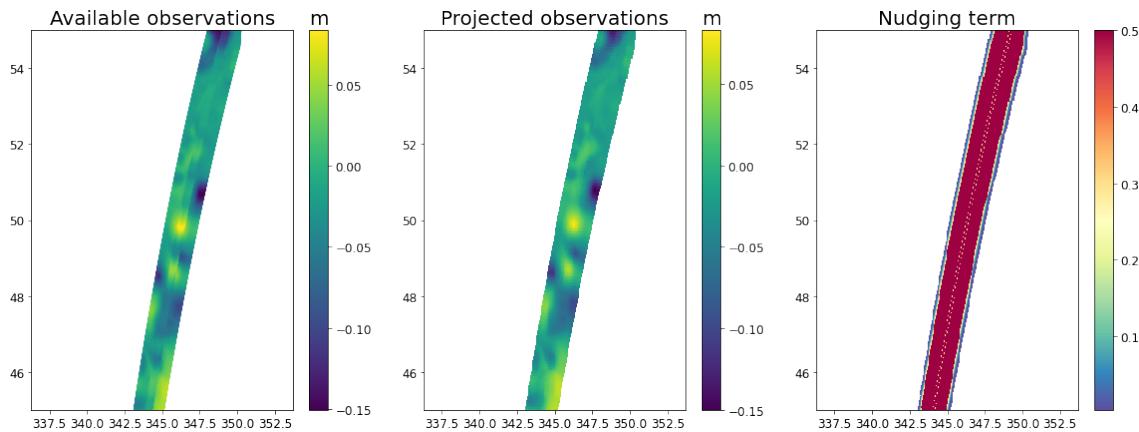


Figure 3.2: Example of spatial projection of SWOT simulated observations, their spatial projection and their corresponding nondimensional nudging coefficient spatial distribution for the Osmosis region, $k_0 = 0.5$ and $D = 10 \text{ km}$.

3.2.3 Temporal window

The BFN runs in a main temporal window of length T as explained in equations (3.8) and (3.9). Moreover, a saving interval window is defined with length smaller than T . This window is centred in the first one, and it selects the values that are saved as BFN output once the convergence is achieved. As all the values of a BFN window are not saved, there is a need to overlap the BFN windows as shown in Figure 3.3. The initial point of the starting BFN window will be taken from the result of the previous BFN window, except for the first BFN window, for which a steady state is taken as initial condition.

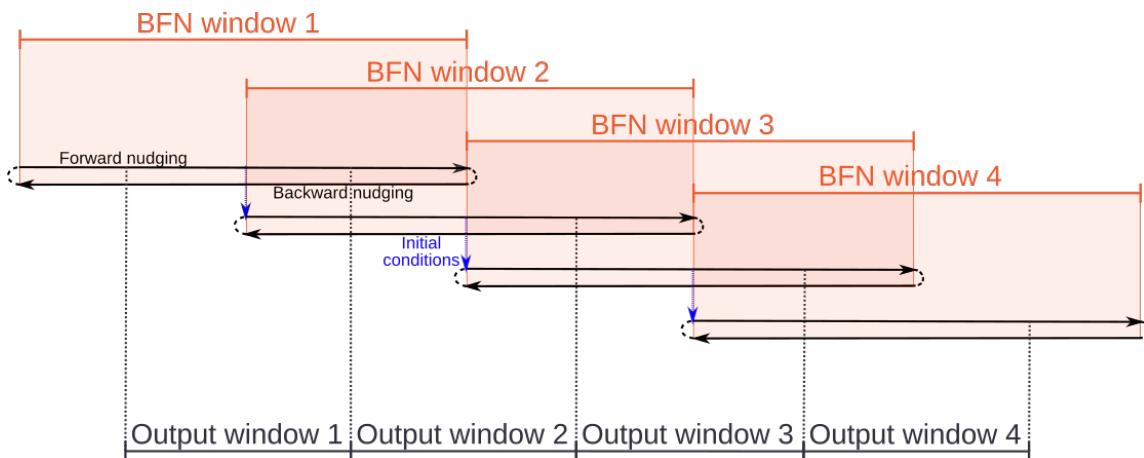


Figure 3.3: BFN process representation for 4 consecutive windows.

3.2.4 Convergence control

In order to control the BFN routine a convergence constant $\mu > 0$ is fixed. This constant will let us know when we can leave a current BFN window and start the following one. The already working convergence control for the 1.5-layer model was based in the error between the backward and forward integration. However, this method does not give good convergence results for the 2-layer configuration. Using first or second layer values with the old convergence method, small changes in the model parameters change drastically the number of loops needed to converge, which is a sign of not being a good indicator of convergence.

Therefore, for the multi-layer model the convergence will be evaluated using a physical variable, the APE in the first interface. When working with a multi-layer model, the APE given by equation (2.11) is discretized for each interface. The APE value for the first interface will be proportional to $(\psi_2 - \psi_1)^2$.

First, we compute the mean APE in the forward integration of the i -th loop, denoted by $APE_i \sim \overline{(\psi_2 - \psi_1)^2}_i$. Afterwards, the relative difference between the two consecutive APE is computed:

$$\delta APE_i = \frac{APE_{i-1} - APE_i}{APE_i} = \frac{\overline{(\psi_2 - \psi_1)^2}_{i-1} - \overline{(\psi_2 - \psi_1)^2}_i}{\overline{(\psi_2 - \psi_1)^2}_i} \quad (3.12)$$

If the absolute relative difference is smaller than the convergence constant, i.e. $|\delta APE_i| < \mu$, then the BFN algorithm is stopped after the i -th loop. Otherwise, it will continue running until the convergence is reached or until a fixed maximum number of loops.

3.3 Implementation of the assimilation method in the models

3.3.1 1.5-layer model

The BFN implementation in a QG 1.5-layer model has been previously done by Florian Le Guillou [Le Guillou, 2020]. Here we use the same configuration to compare the 2-layer model result with the previous work, the main characteristics of the implementation are introduced below.

The model used works as the one-layer model previously described in section 3.1.1 by equations (3.4)-(3.5). The nudging is computed separately on the relative vorticity and the vortex stretching as follows:

$$K(f(\vec{y}) - \vec{x}) = k_\zeta \left[\nabla^2 \left(\frac{g}{f} \text{SSH}_{\text{obs}} \right) - \nabla^2 \psi \right] - \frac{1}{Rd^2} k_s \left(\frac{g}{f} \text{SSH}_{\text{obs}} - \psi \right) \quad (3.13)$$

where k_s and k_ζ are defined as in equation (3.11) and represent the nudging in the SSH and in the RV respectively.

3.3.2 2-layer model

The model works as it is explained in section 3.1.2. Similar nudging to the 1.5-layer model has been implemented. Thee nudging technique uses evolution on PV (equation (3.1)), and nudged

projection can be written as:

$$K(f(\vec{y}) - \vec{x}) = \begin{pmatrix} k_\zeta \left[\nabla^2 \left(\frac{g}{f} \text{SSH}_{\text{obs}} \right) - \nabla^2 \psi_1 \right] - \frac{1}{\Delta h_1} \frac{f_0^2}{N_{1+1/2}^2 \Delta h_{1+1/2}} k_{s1} \left(\frac{g}{f} \text{SSH}_{\text{obs}} - \psi_1 \right) \\ \frac{1}{\Delta h_2} \frac{f_0^2}{N_{1+1/2}^2 \Delta h_{1+1/2}} k_{s2} \left(\frac{g}{f} \text{SSH}_{\text{obs}} - \psi_1 \right) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

we have three nudging coefficients, k_ζ , k_{s1} , k_{s2} . Nevertheless, $k_{s1} = k_{s2}$ will be taken, as these two nudging coefficients are related both to the direct contribution of SSH. Moreover, some test have shown that taking different values could make the model crash.

Before that, writing the model using $\vec{\psi}$ as a prognostic variable and nudging in the same variable has been tried. Nevertheless, this technique was creating non-realistic vorticities in the boundaries of the satellite swath, due to the computation of the laplacian of $\vec{\psi}$ to get the RV part of PV.

When a ocean model is ran in the opposite direction it is theoretically expected to be able to recover previous data, in absence of irreversible processes. In these cases the dissipative coefficients (viscosity and friction) must act in the opposite way if we want the result to be physically consistent. Nonetheless, in our case these coefficients are used for numerical stability to dissipate small-scale energy. For this reason, backward integration still has viscosity and Ekman bottom friction as dissipative terms. The result will not be physically correct but will guarantee the stability of the model during assimilation.

After all, we expect to have the best possible integration in the middle of the last forward process. It is therefore important that convergence is measured only in forward integration values. Furthermore, when compared to BFN window, the output window must be small enough, so the possible errors arising from backward integration can be correct at the beginning of forward integration.

3.4 Calibration of the 2-layer model

The main physical parameters used are the mean Coriolis parameter f_0 in the region, the kinematic viscosity ν , the Ekman bottom friction r , the Brunt-Väisälä frequency in the interfaces N_i and the layer thickness Δh_i . The used multi-layer model runs with non-dimensional parameters, the variables used by the model and their relation with the ones given in this section are listed in Appendix B.

The computation of f_0 is done using its definition taking the mean latitude value for the region where the model is run, the resulting Rossby number form non-dimensionalization is $Ro = 0.018$. The Reynolds number has been taken equal to 1000. The Ekman bottom friction values are given in next section as they depend on the experiment. The Brunt-Väisälä frequency and layer thickness are computed as it follows from the NATL60 density profile.

Given a density profile, a discretization is computed by defining the thickness of the two layers and then computing the mean density profile for each layer. The chosen discretization is the one that maximizes the differences between the mean density of the two layers. This discretization will give the depth of the first layer (Δh_1), the depth of the second layer (Δh_2), the density of the first layer (ρ_1) and the density of the second layer (ρ_2). The result for the Osmosis region is shown in

Figure 3.4. This results in $\Delta h_1 \approx 200\text{m}$ and $\Delta h_2 \approx 3300\text{m}$.

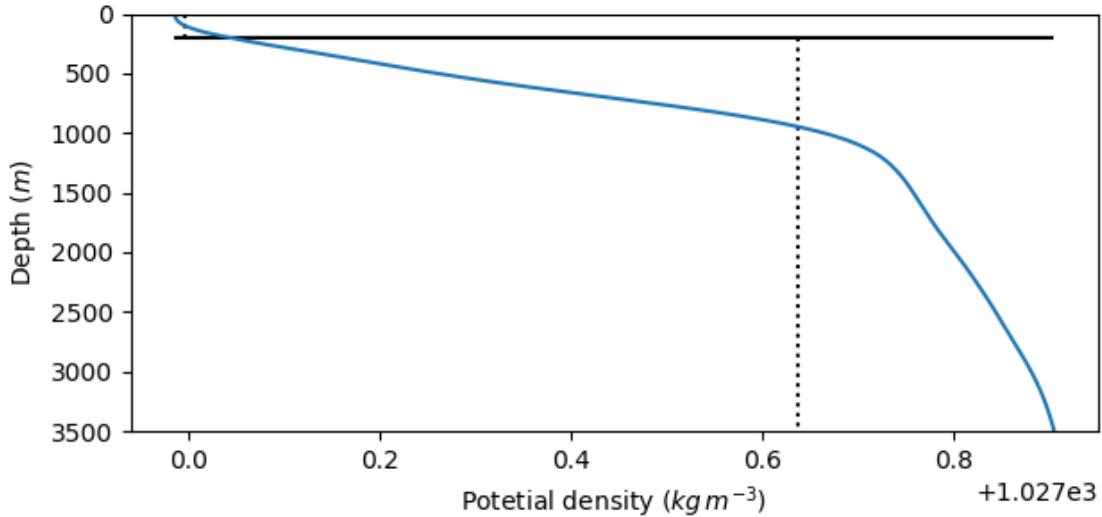


Figure 3.4: The discretization of the NATL60 mean density profile for 1st of March 2013 in the Osmosis region using maximum density difference algorithm.

Later, the computation of the Brunt-Väisälä frequency N is done following the equation (2.8), with the computed discretization:

$$N_{1+1/2} = \sqrt{\frac{g}{\rho_0} \frac{\rho_2 - \rho_1}{\Delta h_{1+1/2}}}, \quad \text{for } \Delta h_{1+1/2} = \frac{\Delta h_1 + \Delta h_2}{2} \quad (3.15)$$

this results in a Froude number close to 0.015.

The Brunt-Väisälä frequency (or Froude number) can be updated during the assimilation process very easily. Computing the first baroclinic Rossby radius of deformation Rd , the linear relation between $N_{1+1/2}$ and Rd can be used for the two-layer configuration to improve the result during the assimilation. This relation is explained in Appendix C. The update of Brunt-Väisälä frequency has not been implemented but it is proposed for future research.

The computation of vertical stratification and calibration of the two-layer model has been done with a new toolbox, which link and characteristics can be found in Appendix D.

3.5 Experiment definition

The used region is conditioned by the numerical scheme of the multi-layer model. It is necessary to use a physical squared grid of equispaced nodes. In addition, the number of nodes on the x and y axis must be a power of 2. For this reason, a central point is defined, at $(20^\circ \text{W}, 50.5^\circ \text{N})$, from which a square region of 256×256 nodes is generated, representing an area of $1300\text{km} \times 1300\text{km}$. This grid gives an approximate resolution of 5km, and as the deformation radius of the first baroclinic mode in Osmosis region is close to 20 km [Chelton et al., 1998]. In consequence, this resolution will be enough for the smaller processes we want to solve.

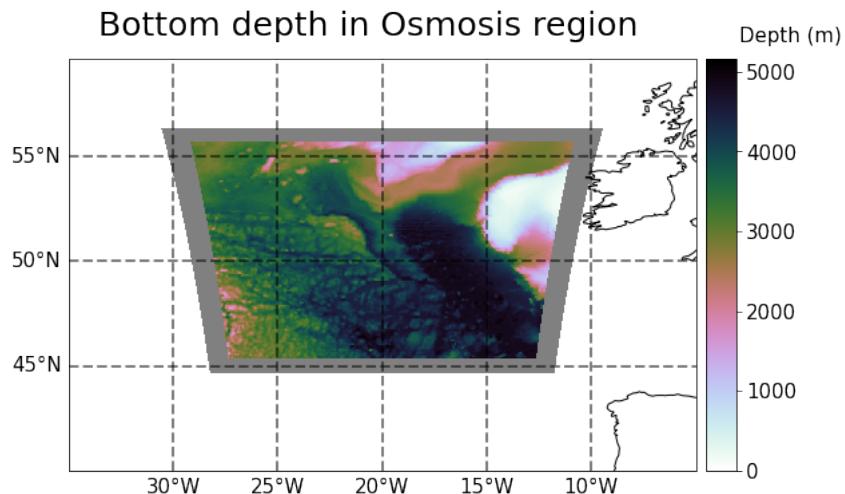


Figure 3.5: Osmosis region sea bottom topography (colored) and sponge area (grey).

The experiments have been ran with a sponge of 76km (15 nodes) in the boundaries. The sponge is used to damp the dynamics as we approach the boundary. In the sponge the values decrease from the central value, to 0 at the boundary. Figure 3.5 shows the region with its sea bottom topography values along with the sponge area.

All experiments have been initiated at the 20th of February 2013.

The configuration taken for the 1.5-layer model (QG1L) configuration is similar to the one used by [Le Guillou \[2020\]](#). A 7-days BFN window is taken, with a 3-days output window. The non-dimensional nudging terms are 0.5 for the SSH and 0.05 for the RV.

The configuration for the 2-layer model (QG2L) is summarised in Table 3.1. A reference experiment (QG2l-ref) is defined with a flat bottom, the Froude number derived from the density profile of NATL60 and the minimum Ekmann bottom friction that ensures the stability. A second experiment is defined with stronger Ekmann bottom friction to study its impact (QG2L-sfric). A third experiment similar to the reference experiment has been ran with topography (QG2L-topo). Finally, two more experiments with topography has been studied where the stratification has been changed by modifying the Froude number (QG2L-hfr and QG2L-lfr).

The two-layer model requires to take a BFN window in which the observations for that time period cover the whole region. Otherwise, the lower layer would start to develop its own dynamics far from the true state, which may cause model crash. Therefore, a larger window is chosen for the 2-layer model, which is 15-days window for BFN process, with a 7-days output window.

For all of the experiment, the temporal scale τ , given in equation (3.11), has been taken equal to 1 day in the case of the SSH and 12 hours in the case of the RV. The distance scale D , given in the same equation, has been taken equal to 50km. The BFN convergence constant μ , introduced in section 3.2.3, has been set to 0.01.

Table 3.1: Experiment configuration for the 2-layer model. Froude number (Fr), the nondimensional Ekman bottom friction (Ekb), topography (Topo) and nondimensional nudging coefficient for SSH and for RV given.

	Fr	Ekb	Topo	Nudging coeff (SSH, RV)
QG2l-ref	0.015	0.003	No	(0.09, 0.05)
QG2L-sfric	0.015	0.100	No	(0.09, 0.05)
QG2l-topo	0.015	0.002	Yes	(0.09, 0.05)
QG2L-hfr	0.020	0.002	Yes	(0.09, 0.05)
QG2L-lfr	0.007	0.002	Yes	(0.09, 0.05)

3.6 Diagnostics

The data is studied between the 1st of March and the 15th of March of the same year, except for second layer speeds. As 3D data is very heavy, the second layer speed is only studied until 7th of March. The figures from the next section show the inner region, without the sponge. The diagnostics are computed in the centred box of size $812\text{km} \times 812\text{km}$ (160×160 nodes), the outer region is shaded in the maps. Root Mean Square Error (RMSE) and the Power Spectral Density (PSD) have been used to evaluate the daily data output.

The RMSE is given by

$$\text{RMSE}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X(t, i) - X^{\text{true}}(t, i))^2} \quad (3.16)$$

where N is the total number of nodes to study, $X(t, i)$ is the value of the i -th node at time t and $X^{\text{true}}(t, i)$ is the true value of the i -th node at time t retrieved from the true state (NATL60). The RMSE is sensitive to phase errors and will show when structures are shifted from their true state.

The PSD of a one-dimensional space variable $X(t, x)$ at time t , where x is the position, is given by:

$$\text{PSD}(t, k) = |\hat{X}(t, k)|^2 \quad (3.17)$$

where $\hat{X}(t, k)$ is the discrete Fourier transform of $X(t, x)$ in x , being k the wave-number.

The definition of 1D PSD for two-dimensional data is similar. For a given $X(t, x, y)$ signal at time t , the Fourier transform is done in the two spatial coordinates, giving $\hat{X}(t, k, j)$. The 2D spectra is computed as the 1D spectra:

$$\text{PSD}_{2\text{D}}(t, k, j) = |\hat{X}(t, k, j)|^2 \quad (3.18)$$

Next, k, j basis is transformed to polar coordinates defining $m = \sqrt{k^2 + j^2}$ and θ the angle between k and j , and the one-dimensional PSD is computed by averaging $\text{PSD}_{2\text{D}}$ in the angular dimension θ .

The PSD quantifies the energy distribution in the different scales. If big length-scales are well reconstructed, then the PSD for small wave-numbers will match the PSD of the true state. The

wave-number from which the PSD value differs from the value of the true state will define the scale until which the data is well solved.

Both diagnostics are complementary, and we cannot ensure the improvements in the reconstruction if we do not have better results for both.

4 | Results and discussions

4.1 Reference experiment result

A reference experiment without topography has been defined (QG2L-ref) with the lowest bottom Ekman friction that ensures the stability of the model. We will first describe the results of this experiment. We compare the upper layer values to the true state from NATL60 and the results from the 1.5-layer model experiment (QG1L). The lower layer values are validated with only NATL60 data as a reference. Next, the sensitivity of the model to Ekman bottom friction, topography and stratification will be discussed.

4.1.1 Upper layer dynamics

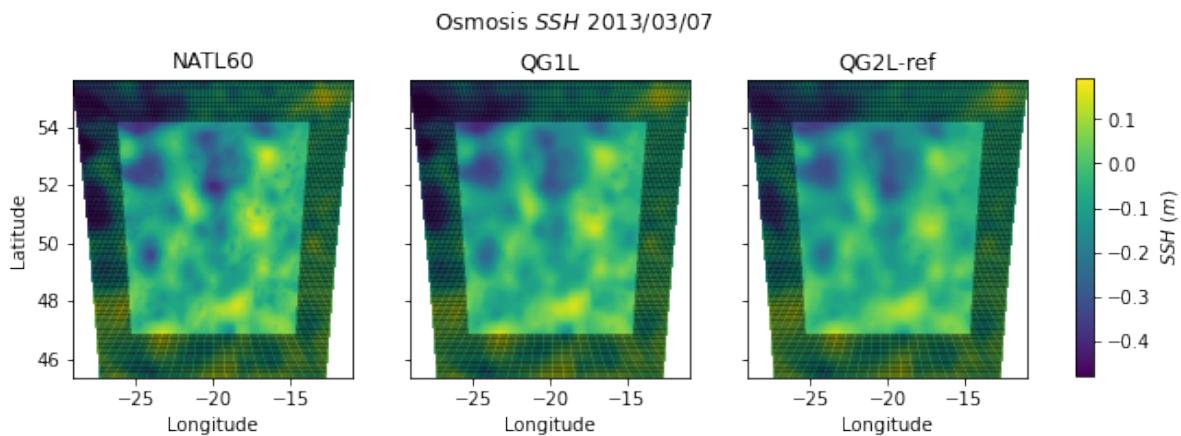


Figure 4.1: SSH maps for NATL60, QG1L and QG2L-ref for the 7th of March 2013.

The reconstruction of surface data like SSH is interesting because it can be compared with QG1L and see if the two-layer model is able to improve it. The reconstruction of the SSH data given by QG2L-ref is good. Nevertheless, QG1L achieves a better reconstruction. Figure 4.1 shows that the highest SSH values are better reproduced by QG1L, and also the small scale structures in the East and in the North are better reproduced by QG1L. The best results of QG1L over QG2L-ref can be validated with the RMSE values shown in Figure 4.2.

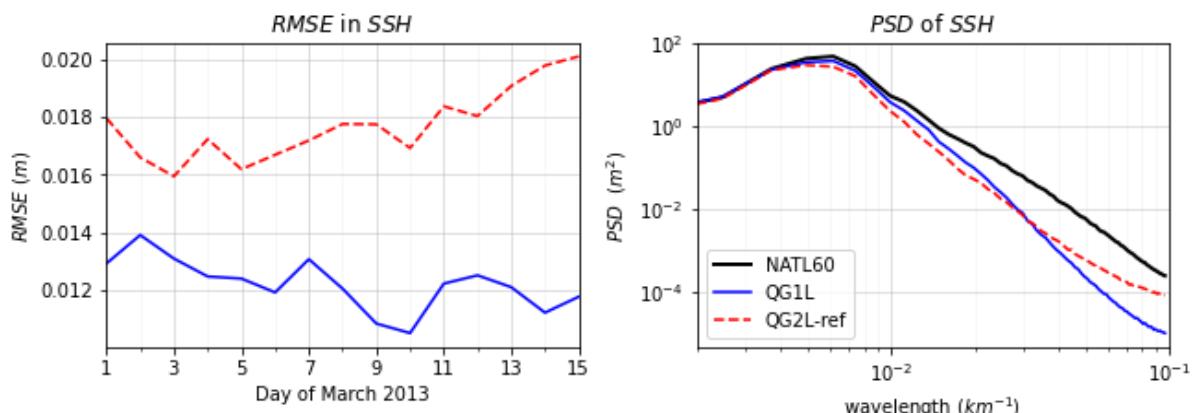


Figure 4.2: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for SSH for QG1L and QG2L-ref.

The PSD of the SSH (shown also in Figure 4.2) shows that QG2L-ref has some improvement in the density of dynamics at a smaller scale, since for higher wave-number PSD values are closer to the value of NATL60. However, these values are close to the grid resolution and so they are not reliable. Moreover, both the QG1L and the QG2L-ref lose the representation of PSD at similar wavelengths.

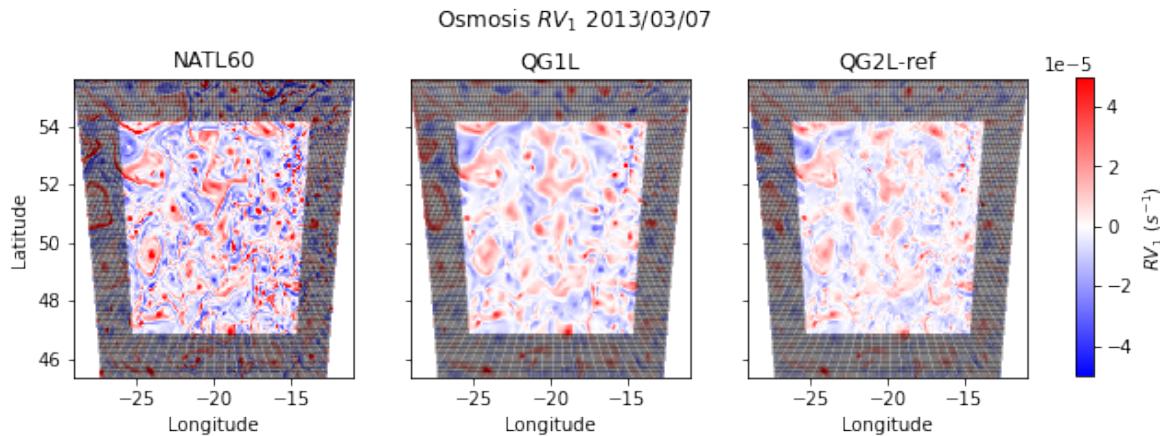


Figure 4.3: Surface RV maps for NATL60, QG1L and QG2L-ref for the 7th of March 2013.

An improvement in the small scale dynamics representation could be clearly seen by comparing the RV results. As RV is a second derivative of the stream function it represents smaller scale processes. Nonetheless, Figure 4.3, which shows the surface RV maps does not show a clear improvement of QG2L-ref respect to QG1L. In fact, RMSE values for RV give better results for QG1L, as can be seen in Figure 4.4.

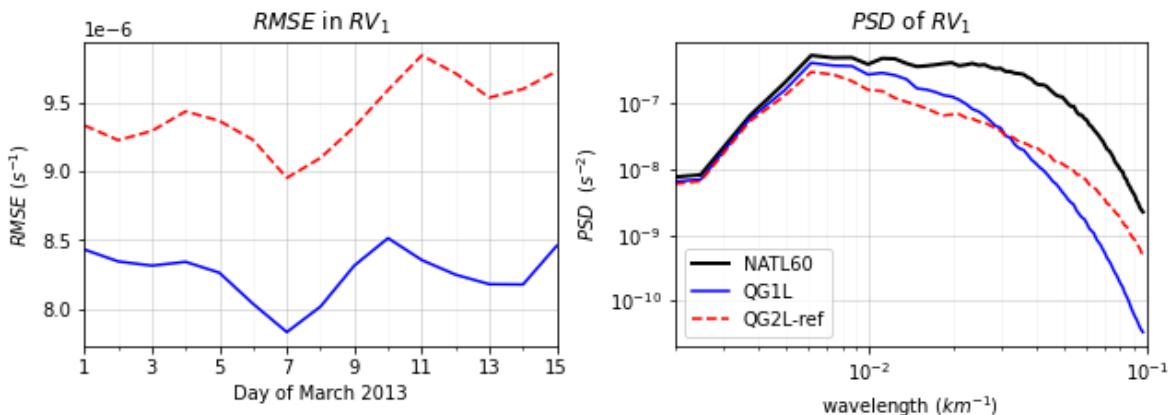


Figure 4.4: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for surface relative vorticity for QG1L and QG2L-ref.

4.1.2 Lower layer dynamics

The main difference with the 2-layer model from the 1.5-layer model is that the dynamics of the deep ocean can be reconstructed. However, we have no previous reference study using SWOT-like observations to validate the lower layer reconstruction.

The modulus of the horizontal speed (UV_2) has been computed for that purpose. In the case of NATL60 data the velocity profile of NATL60 has been calculated by the average values at the depths represented by the second layer of QG2L, using 3D data for zonal speed (U) and meridional speed (V). While for the two-layer model experiments this has been done using second layer stream function (ψ_2).

Figure 4.5 shows that the velocity field has the correct order of magnitude. However, the second layer dynamics are slower for QG2L-ref, and in the bottom right are the dynamics are almost non-existent. The size of structures is not completely wrong, but they are misplaced. A reduction of the Ekman bottom friction coefficient for QG2L-ref could be done to try to increase the dynamics in the second layer, but smaller values of this friction have made the model develop strong dynamics in the upper right corner which crashed the model.

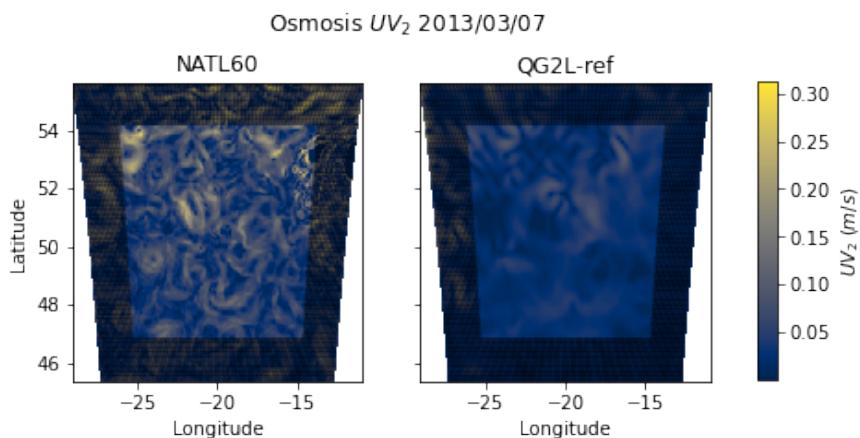


Figure 4.5: Second layer horizontal speed modulus maps for NATL60 and QG2L-ref for the 7th of March 2013.

We expect the second layer speed from QG2L to reproduce the mean speed in the depths that represents in NATL60. Nevertheless, some differences are expected, as the speed computed from QG2L comes from a geostrophic approximation but the one computed from NATL60 does not. Therefore, in NATL60 data other factors such as temperature or salinity can affect the speed profile. Topography also plays a very important role in the dynamics of NATL60, as it can completely change the speed profile at depth. The primitive equations used by NATL60 are able to reproduce a lot of physical processes that cannot be reproduced by the QG approximation.

4.2 Impact of bottom friction

Bottom friction is needed to dissipate energy in the lower layer of the 2-layer model. Each time observation data is assimilated, the energy corresponding to the dynamics produced in the upper layer is transmitted to the lower layer. If the excess energy is not dissipated the model will crash. The reconstruction of surface variables are better when Ekman bottom friction is higher. In this case, the second layer does not develop the dynamics so $\psi_2 \approx 0$. In consequence, the stretching part of first layer's PV is only affected by ψ_1 value, which makes the 2-layer be closer to the 1.5-layer model. If we take the stratification big enough so $\psi_2 = 0$, then the only difference between

the two models will be the value of the constant multiplying the stretching part.

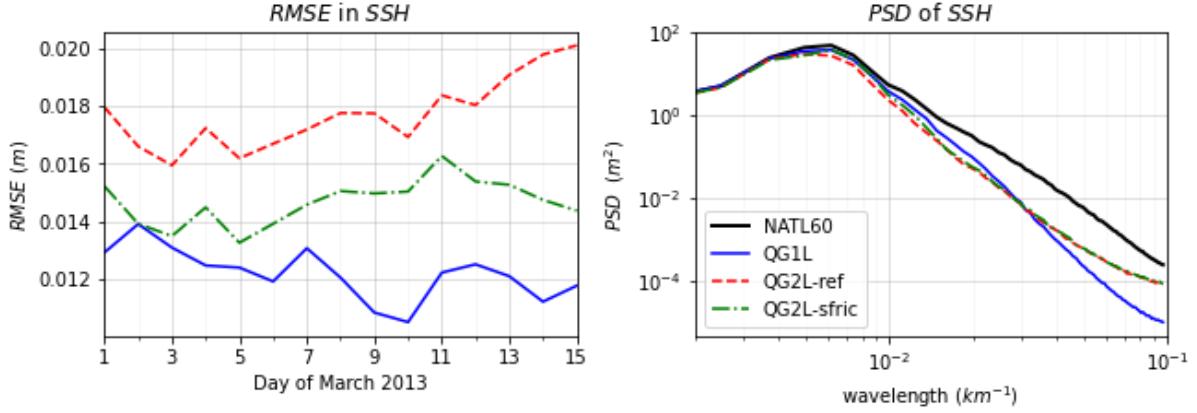


Figure 4.6: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for SSH for QG1L, QG2L-ref and QG2L-sfric.

Therefore, a experiment with extremely high bottom friction has been defined (QG2L-sfric). It can be seen that QG2L-sfric obtains slightly better results than QG2L-ref when solving the SSH values, since the RMSE respect to NATL60 is lower, see Figure 4.6. The improvement can be also seen in the surface RV RMSE and PSD values, see Figure 4.7.

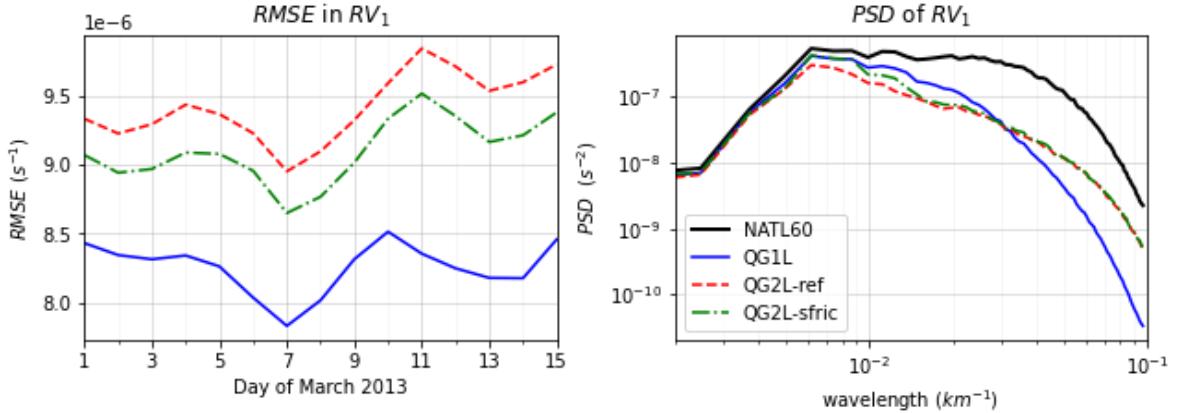


Figure 4.7: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for surface relative vorticity for QG1L, QG2L-ref and QG2L-sfric.

Figure 4.8 shows how the stream function of second layer values of QG2L-sfric are negligible compared to the values of QG2L-ref, and as have been discussed before the values of the second layer dynamics of QG2L-ref is slower than the dynamics given by NATL60. Consequently, strong Ekman bottom friction will not be helpful for improving the second layer results as it develops much slower dynamics. This could be problematic as when varying the bottom friction the optimal result for the first layer do not match the optimal result for the second layer.

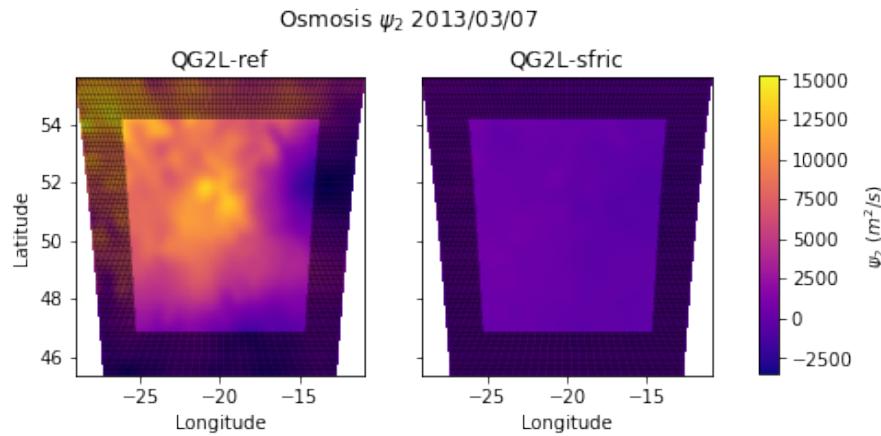


Figure 4.8: Second layer stream function maps for QG2L-ref and QG2L-sfric for the 7th of March 2013.

4.3 Impact of bottom topography

Previously described experiments have not taken into account the sea bottom topography. However, the Osmosis region has a rather variable topography. The bottom depth reaches approximately 4000m in the Northwest part. Meanwhile, the eastern part is about 200m deep, due to the European continental platform, see Figure 3.5.

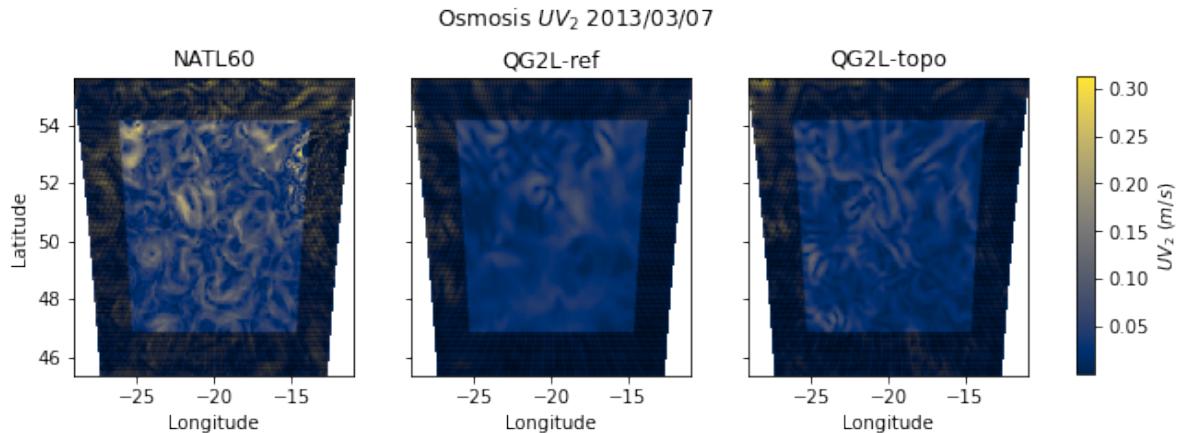


Figure 4.9: Second layer horizontal speed modulus maps for NATL60, QG2L-ref and QG2L-topo for the 7th of March 2013.

The topography will only affect the PV of the lower layer and the value of q_2 must be updated adding $-f \frac{\Delta h'_2}{\Delta h_2}$, where Δh_2 is the mean thickness of the lower layer and $\Delta h'_2$ is the thickness anomaly given by the topography, in other words $\Delta h_2 + \Delta h'_2$ is the real thickness of the lower layer with topography. According to the QG approximation, variation of topography should be small, $\Delta h'_2 \ll \Delta h_2$. The topography should be also smooth, that is why the used topography is not the real one from the figure 3.5, a Gaussian filter has been applied with standard deviation equal to 2 to smooth the topography. Moreover, the use of topography has made it possible to slightly reduce the Ekman bottom friction value.

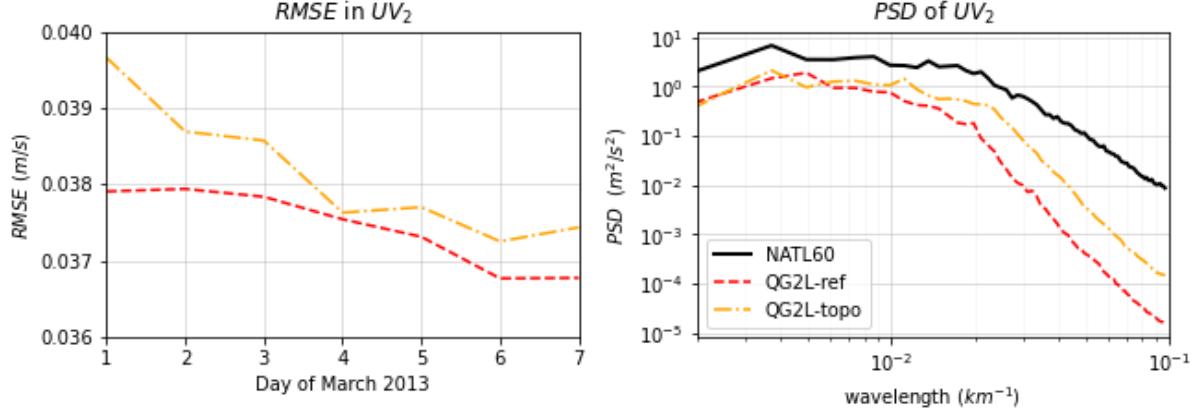


Figure 4.10: RMSE time series from March 1st to March 7th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for horizontal speed modulus of second layer for QG2L-ref and QG2L-topo.

In Figure 4.9 we can see the comparison of UV_2 for the reference experiment without topography (QG2L-ref) and the experiment with topography (QG2L-topo). The result of the experiment with topography for the second layer is better. Smaller scale dynamics are observed, which are also visible in the PSD, see Figure 4.10. Moreover, the dynamics are now present in the whole region. Nevertheless, in the same Figure we can see that there is no improvement in the RMSE values of UV_2 . This is because the dynamics of the second layer are still misplaced although using topography. The reconstruction of SSH given by QG2L-topo is worse than the reconstruction given by QG2L-ref, see RMSE values in Figure 4.11.

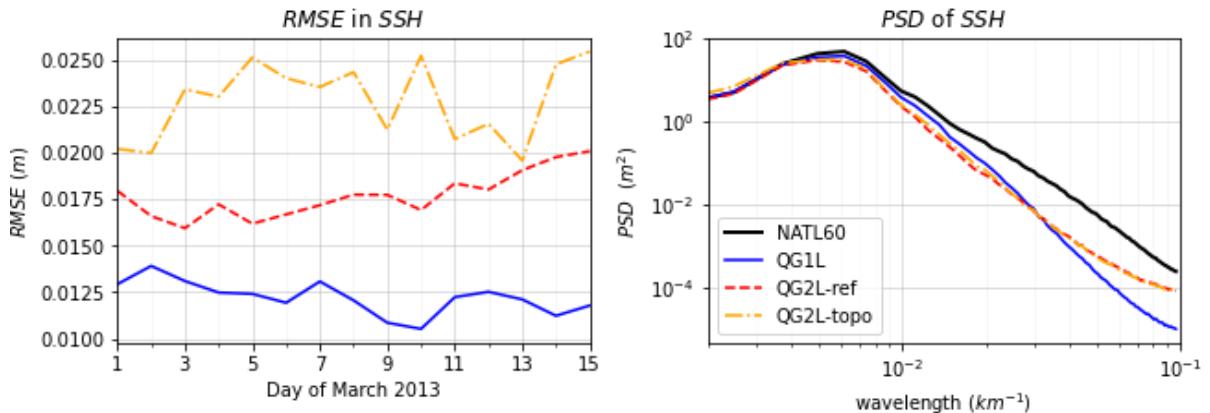


Figure 4.11: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for SSH for QG1L, QG2L-ref and QG2L-topo.

4.4 Impact of the stratification

The stratification plays a key role in the QG dynamics as mentioned in section 2.2. A variation in stratification will cause a variation in the Brunt-Väisälä frequency N , and thus a variation in the Froude number. The stratification value in the two-layer discretization will give the Rossby radius of deformation (Rd), as it is deduced in Appendix C for a two-layer discretization. Stronger stratification (smaller Froude number) will make the dynamics more stable and will have bigger

Rd value, which means that the dynamics generated by the baroclinic instability will exhibit larger scale. The opposite case will happen if the stratification is reduced.

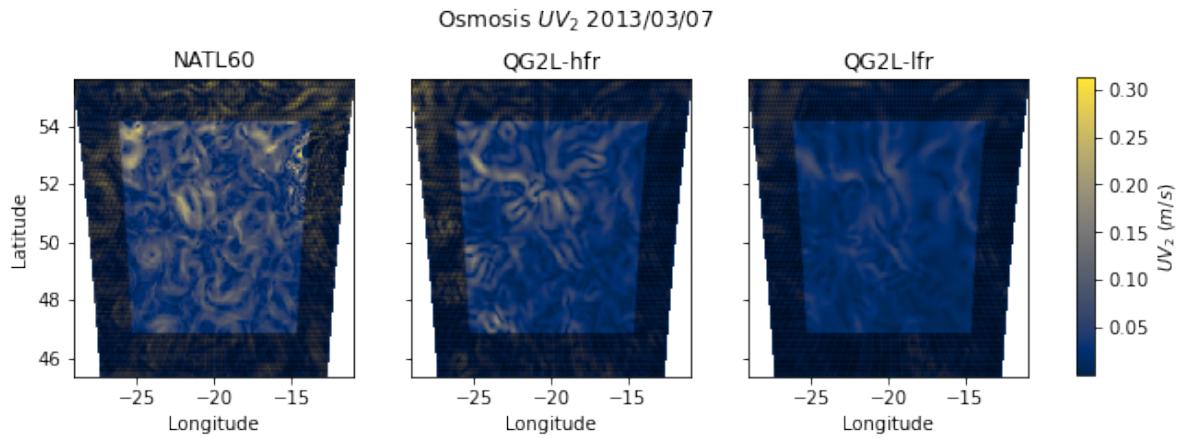


Figure 4.12: Second layer horizontal speed modulus maps for NATL60, QG2L-bfr and QG2L-lfr for the 7th of March 2013.

The vertical structure of the stratification in the two-layer model has been studied with the topography, with the objective to improve second layer dynamics. On the one hand, an experiment with a slightly higher Froude number (QG2L-hfr) has been defined. Increasing the Froude number too much caused the model crash. On the other hand, a second experiment with a lower Froude has been defined (QG2L-lfr). This second experiments uses the Froude number derived from the first baroclinic Rossby radius of deformation in the region.

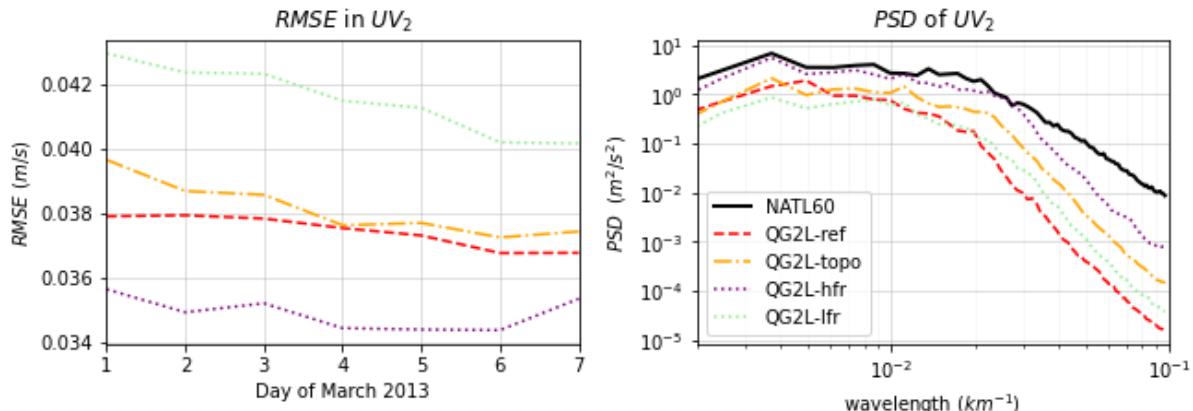


Figure 4.13: RMSE time series from March 1st to March 7th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for horizontal speed modulus of second layer for QG2L-ref, QG2L-topo, QG2L-hfr and QG2L-lfr.

The maps of the UV_2 for QG2L-hfr and QG2L-lfr are shown in Figure 4.12. The dynamics developed in the second layer by QG2L-lfr are far from the ones from NATL60. The pattern is different, and the intensity of the dynamics is even smaller due to the increase of the stratification. Studying the RMSE and PSD of the second layer horizontal speed we see that the result is farther than the one achieved by QG2L-topo.

By contrast, QG2L-hfr improves the previous result given by QG2L-topo. The improvement is clearly shown in the values of RMSE and PSD in Figure 4.13, as it is the experiment with lower RMSE and that better reconstructs the PSD. In spite of this, the maps from Figure 4.12 show that the structures of horizontal speed modulus of NATL60 and QG2L-hfr do not match.

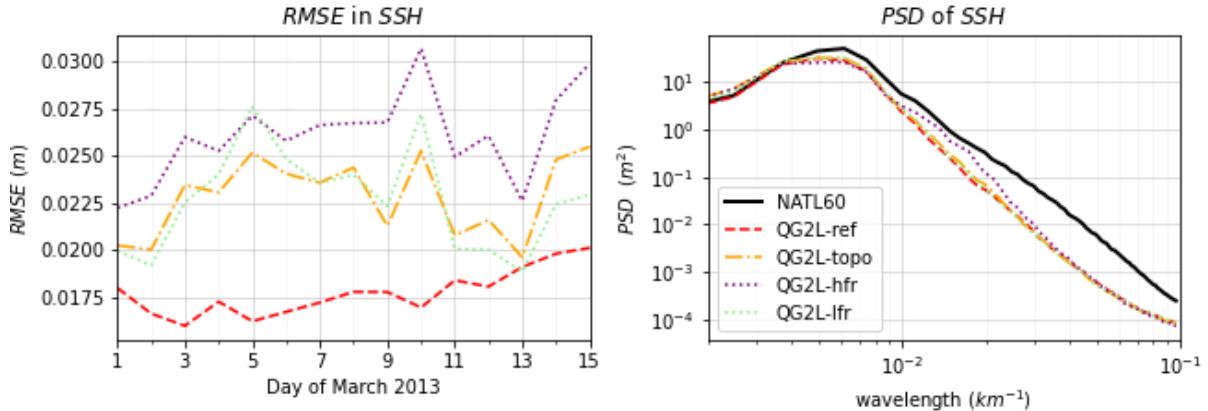


Figure 4.14: RMSE time series from March 1st to March 15th 2013 (left) and the mean PSD in the same dates (right) for SSH for QG1L, QG2L-ref, QG2L-topo, QG2L-hfr and QG2L-lfr.

If we focus on surface data, the diagnostics for QG2L-lfr for SSH are not different from the ones for the previous experiment QG2L-topo, see Figure 4.14. Nevertheless, in the same figures we can see that the reconstruction of this values for QG2L-hfr is the worst. This supports the previous statement when varying the Ekman bottom friction, where we suggested that the configuration that gives the best reconstruction of the upper layer does not give the best reconstruction for the lower layer.

4.5 Some comments on the reconstruction of second layer data

The reconstruction of second layer data is far from the true state as the structures are misplaced. We expected some discrepancies as the nudging is done in upper layer and the QG approximation cannot reproduce totally the true state from NATL60. The impact of bottom topography can be a key role on that as well. In the QG approximation topography works only modifying the PV value and needs to be smooth. While in NATL60 the interaction of the topography with the velocity profile is much more complex.

In contrast, previous studies with multi-layer models have not had this problem in the lower layers. Verron [1990] and Verron [1992] achieve good results in the lower layers after nudging surface values. However, these studies use the same QG model to create the true state used for validate the results and to assimilate data from simulated observations. Therefore, they always compare geostrophic velocities.

5 | Conclusions and perspectives

We have implemented the back and forth nudging method in a quasi-geostrophic multi-layer model (see Appendix D for more information on the implementation and development of the project). This work has allowed us to assimilate the data from SWOT-like observations in a physically realistic framework of a two-layer configuration. The reconstruction of the SSH data has been satisfactory and can be compared with previous similar studies.

Even so, it has not been possible to improve the reconstruction of surface data as expected. The reduced gravity model has achieved better results for SSH and surface relative vorticity than the two-layer model for the used configurations. The degree of freedom added by having a second layer that develops its own dynamics has not improved the surface data reconstruction.

The reconstruction of the deep ocean data is the main novelty with the previous similar studies. The pattern represented by the two-layer model is not the same as the original one derived from the true state, i.e., the full 3D simulation of the ocean circulation used to simulate the SWOT observations to be assimilated. Nonetheless, it has been possible to reconstruct the velocity profile of the deep ocean with the same order of magnitude.

Stratification data reconstruction is uncertain. The two-layer model is quite sensitive to the used configuration with which it is used. This causes the model to converge to a state that seems optimal even if the Froude number is not correct, if for example the Ekman bottom friction is increased. Ideally, it would be necessary to find, or at least prove the existence, of a set of physically realistic configuration that would result in an optimal reconstruction for both surface and bottom data.

Being the back and forth nudging a new and original method, we do not have a good perspective of its capacity to reconstruct values of unobserved variables. The capacity of this method can be limited in this way, especially when there are new degrees of freedom that are not controlled. It is therefore possible that the problems of reconstruction of the lower layer data are a limitation of the assimilation method used.

The implementation of the update of the Brunt-Väisälä frequency during the assimilation process can be implemented, as mentioned at the end of section 3.4. This would allow observing if the model tends to recover the frequency given by the NATL60 density profile, if it approaches the one corresponding to the Rossby radius of deformation of the region or if there is some other optimal frequency. This implementation could prove if there really is an optimal state of configuration of the two-layer model. This would clear the doubts about using the two-layer model to reconstruct the stratification values.

Improvements could be expected by increasing the number of observations that are assimilated. An easy option to implement would be to add satellite observations from previous missions, together with the SWOT's Nadir altimeter (see Appendix A), which provides one-dimensional observations between the two swaths. This would improve the reconstruction of surface data as it is already shown by Le Guillou [2020], but does not ensure that the two-layer model will improve its reconstruction over the one and a half layer model reconstruction.

To improve the results of the two-layer model over the reduced gravity model, it is possibly necessary to consider the assimilation of data that can control the added degree of freedom. This could be done by nudging data to correct the value of the second layer dynamics or to update the

values of the stratification. Within the OSSE framework, this data could represent, for example, the in-situ values measured by the ARGO project given profiles.

A region more suitable for the two-layer model could be used. For example, by modifying the position and size of the original region so that it does not coincide with the continental platform and the topography does not vary much throughout the region. Although the objective would be to be able to reconstruct the data in the same region used previously in other studies, it is possible that the two-layer model is only optimal if it is used under strict conditions such as a minimum of ocean depth in the region. Moreover, faster dynamics regions as Gulfstream can be studied in the future.

Finally, the use of a three-layer configuration could also be studied. Using two thin layers, one superficial layer not larger than the one already used, a second layer not deeper than 1000m and a big third layer with no-motion (using strong Ekman friction or an extremely high thickness). By not introducing dynamics into the third layer the model will continue to work with two degrees of freedom, and the deep layer will only be used to absorb the extra energy introduced into the model after assimilation. This configuration would be similar to that of a two and a half layer model.

Bibliography

- A. Ajayi, J. L. Sommer, E. Chassignet, J.-M. Molines, X. Xu, A. Albert, and E. Cosme. Spatial and Temporal Variability of the North Atlantic Eddy Field From Two Kilometric-Resolution Ocean Models. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 125(5):e2019JC015827, 2020. ISSN 2169-9291. doi: 10.1029/2019JC015827.
- D. Auroux and J. Blum. Back and forth nudging algorithm for data assimilation problems. *Comptes Rendus Mathematique*, 340(12):873–878, June 2005. ISSN 1631-073X. doi: 10.1016/j.crma.2005.05.006.
- D. Auroux and J. Blum. A nudging-based data assimilation method: the Back and Forth Nudging (BFN) algorithm. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 15(2):305–319, Mar. 2008. ISSN 1023-5809. doi: 10.5194/npg-15-305-2008. Publisher: Copernicus GmbH.
- D. B. Chelton, R. A. deSzoeke, M. G. Schlax, K. El Naggar, and N. Siwertz. Geographical Variability of the First Baroclinic Rossby Radius of Deformation. *Journal of Physical Oceanography*, 28(3): 433–460, Mar. 1998. ISSN 0022-3670. doi: 10.1175/1520-0485(1998)028<0433:GVOTFB>2.0.CO;2.
- B. Cushman-Roisin and J.-M. Beckers. *Introduction to Geophysical Fluid Dynamics*. Elsevier Science, 1994. ISBN 0-13-353301-8.
- C. Dufau, M. Orsztynowicz, G. Dibarboire, R. Morrow, and P.-Y. L. Traon. Mesoscale resolution capability of altimetry: Present and future. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 121(7):4910–4927, 2016. ISSN 2169-9291. doi: 10.1002/2015JC010904.
- G. R. Flierl. Models of vertical structure and the calibration of two-layer models. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 2(4):341–381, Aug. 1978. ISSN 0377-0265. doi: 10.1016/0377-0265(78)90002-7.
- G. Gaspari and S. E. Cohn. Construction of Correlation Functions in Two and Three Dimensions. *Internal Report from DAO*, 1998.
- L. Gaultier, C. Ubelmann, and L.-L. Fu. The challenge of using future SWOT data for oceanic field reconstruction. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 33:151113145655001, Nov. 2015. doi: 10.1175/JTECH-D-15-0160.1.
- F. Le Guillou. Mapping altimetry in the forcoming SWOT era by back-and-forth nudging the quasi-geostrophic dynamics. *No published*, 2020.
- P. Y. Le Traon, F. Nadal, and N. Ducet. An Improved Mapping Method of Multisatellite Altimeter Data. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 15(2):522–534, Apr. 1998. ISSN 0739-0572. doi: 10.1175/1520-0426(1998)015<0522:AIMMOM>2.0.CO;2. Publisher: American Meteorological Society.
- R. Morrow, L.-L. Fu, F. Ardhuin, M. Benkiran, B. Chapron, E. Cosme, F. d’Ovidio, J. T. Farrar, S. T. Gille, G. Lapeyre, P.-Y. Le Traon, A. Pascual, A. Ponte, B. Qiu, N. Raschle, C. Ubelmann, J. Wang, and E. D. Zaron. Global Observations of Fine-Scale Ocean Surface Topography With the Surface Water and Ocean Topography (SWOT) Mission. *Frontiers in Marine Science*, 6, 2019. ISSN 2296-7745. doi: 10.3389/fmars.2019.00232.

- P.-Y. Traon. From satellite altimetry to Argo and operational oceanography: Three revolutions in oceanography. *Ocean Science Discussions*, 10:1127–1167, July 2013. doi: 10.5194/osd-10-1127-2013.
- C. Ubelmann, P. Klein, and L.-L. Fu. Dynamic Interpolation of Sea Surface Height and Potential Applications for Future High-Resolution Altimetry Mapping. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 32(1):177–184, Oct. 2014. ISSN 0739-0572. doi: 10.1175/JTECH-D-14-00152.1.
- G. K. Vallis. *Atmospheric and oceanic fluid dynamics: fundamentals and large-scale circulation*. 2nd ed edition, 2017. ISBN 978-1-107-58841-7. doi: 10.1017/9781107588417.
- J. Verron. Altimeter data assimilation into an ocean circulation model: Sensitivity to orbital parameters. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 95(C7):11443–11459, 1990. ISSN 2156-2202.
- J. Verron. Nudging satellite altimeter data into quasi-geostrophic ocean models. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 97(C5):7479–7491, 1992. ISSN 2156-2202. doi: 10.1029/92JC00200.

Appendices

A SWOT measurement technique

SWOT measurement technique is shown in Figure A.1. SWOT's interferometers will recover two-dimensional surface data. The cross-track of the swath will be approximately 120km long, with a gap of 20km in the middle. SWOT will also have a Nadir altimeter in the middle of the gap, which is able to recover along-track data. However, we have only used the two-dimensional swaths for the study. For more information about SWOT measurement technique, error and capability see [Morrow et al. \[2019\]](#).

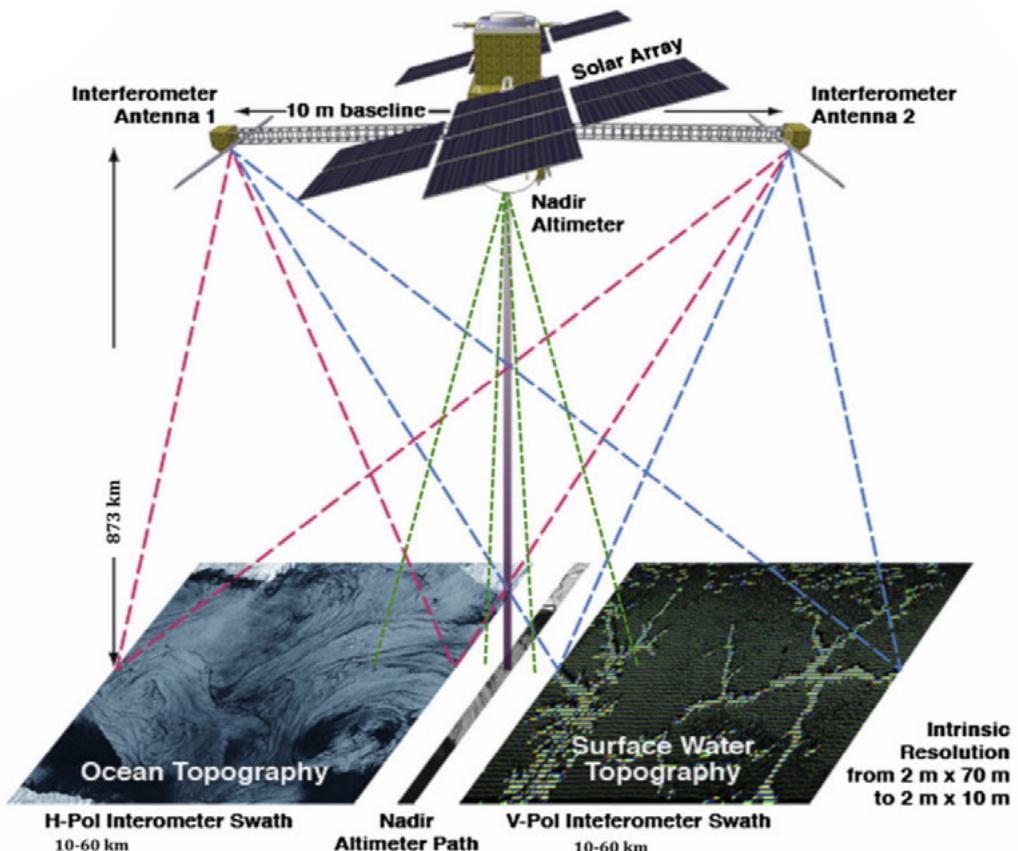


Figure A.1: Schematic of the SWOT measurement technique. Extracted from [Morrow et al. \[2019\]](#).

B Non-dimensional parameters of the multi-layer model

In order to work with the multi-layer model it is necessary to express the parameters in their non-dimensional value. First, we need to set some non-dimensionalizing constants:

$$U = 0.1 \text{ m/s}, \quad L = 50 \text{ km}, \quad H = \text{total depth}, \quad \rho_0 = 1029 \text{ kg/m}^3$$

We can compute the parameters used by the model using the conversions from table B.1. The non-dimensionalizing process is important to ensure the convergence of the model and avoid underflow and overflows issues when doing the numerical computation.

Table B.1: Non dimensional parameters used by the model.

Dimensional parameter		Non-dimensional parameter	
Box total length	L_{box}	\rightarrow	$L_0 = \frac{L_{\text{box}}}{L}$
Time step	Δt	\rightarrow	$DT = \frac{\Delta t U}{L}$
Coriolis parameter	f_0	\rightarrow	$\text{Rom} = \frac{U}{f L}$
Meridional gradient of f	β	\rightarrow	$\text{beta} = \frac{\beta L^2}{U}$
Kinematic viscosity	ν	\rightarrow	$\text{Re} = \frac{U L}{\nu}$
Kinematic biharmonic viscosity	ν_4	\rightarrow	$\text{Re4} = \frac{U L^3}{\nu_4}$
Ekman bottom friction	r	\rightarrow	$\text{Ekb} = \frac{r L}{U}$
Wind shear stress	τ	\rightarrow	$\text{tau0} = \frac{\tau}{U^2}$
Brunt-Väisälä frequency	N_i	\rightarrow	$\text{Fr}_i = \frac{U}{N_i H}$
Layer thickness	Δh_i	\rightarrow	$\text{dh}_i = \frac{\Delta h_i}{H}$

C Computation of baroclinic Rossby radii of deformation

The computation of the Rossby radii of deformation can be done by solving the Sturm-Liouville eigenvalue problem for the vertical structure $\phi(z)$ of the vertical velocity, as it is showed by [Chelton et al. \[1998\]](#):

$$\begin{cases} \frac{d^2\phi}{dz^2} + \frac{N^2(z)}{c^2}\phi = 0 \\ \frac{d^2\phi}{dz^2} = 0 \end{cases} \quad \text{at } z = 0 \text{ and } z = -H \quad (\text{C.1})$$

where H is the total depth, and c is the phase speed. This problem has infinite eigenvalues c_i^{-2} for their corresponding eigenfunctions $\phi_i(z)$. Out of the equatorial band the Rossby radius of deformation is defined as $Rd = \frac{c}{|f|}$, where f is the Coriolis parameter. In consequence, changing the c^2 in equation (C.1) by $f^2 Rd^2$, we can solve our problem for the Rd_i^{-2} eigenvalues.

In the numerical case, we compute the radii of deformation by solving the eigenvalues of the tridiagonal gamma stretching matrix S of size $n \times n$, for n the number of layers. S will be given by:

$$\begin{cases} S_{i,i+1} = S_i^\uparrow = \frac{-f^2}{\Delta h_i \Delta h_{i+1/2} N_{i+1/2}^2} & \text{for } i = 1, \dots, n-1 \\ S_{i+1,i} = S_i^\downarrow = \frac{-f^2}{\Delta h_{i+1} \Delta h_{i+1/2} N_{i+1/2}^2} & \text{for } i = 1, \dots, n-1 \\ S_{i,i} = S_i^D = - (S_i^\uparrow + S_{i-1}^\downarrow) & \text{for } i = 1, \dots, n \text{ using } S_n^\uparrow = S_0^\downarrow = 0 \\ S_{i,j} = 0 & \text{if } |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

where Δh_i is the thickness of the i -th layer, $\Delta h_{i+1/2} = 1/2 (\Delta h_i + \Delta h_{i+1})$ and $N_{i+1/2}$ is the Brunt-Väisälä frequency between the layers i and $i+1$.

Let $\lambda_0, \dots, \lambda_{n-1}$ be the sorted eigenvalues of S . Consequently, for $i = 1, \dots, n-1$, $\lambda_i^{-1/2}$ will be the i -th baroclinic Rossby deformation radius; and $\lambda_0^{-1/2}$ will be the barotropic radius of defor-

mation, infinite in the QG, so $\lambda_0 = 0$.

In the case of a two layer model, lets denote Rd the first baroclinic Rossby deformation radius, therefore $Rd = \lambda_1^{-1/2}$. In this case we only have one value of Brunt-Väisälä frequency, $N_{1+1/2}$. So keeping the discretization depth constant, $\Delta h_i = \text{cte}$, if we modify $N_{1+1/2}$ then we will have a proportional variation on S , as:

$$S \sim \frac{1}{N_{1+1/2}^2} \quad (\text{C.3})$$

which will give us the relation:

$$\frac{1}{Rd^2} \sim \frac{1}{N_{1+1/2}^2} \quad (\text{C.4})$$

In fact in the two layer case 2 layer case, we can write S as:

$$S = \frac{f^2}{\Delta h_{1+1/2} \Delta h_1 \Delta h_2 N_{1+1/2}^2} \begin{pmatrix} \Delta h_2 & -\Delta h_2 \\ -\Delta h_1 & \Delta h_1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

which makes very easy to compute the eigenvalues of S by computing the characteristic polonium of the matrix from equation (C.5), which has solutions for 0 and $\Delta h_1 + \Delta h_2$, when multiplying by the constant outside the matrix we can get back the value of the eigenvalues of S and thus the radius value:

$$Rd^2 = \frac{\Delta h_1 \Delta h_2 N_{1+1/2}^2}{2 f^2} \quad (\text{C.6})$$

D Contribution to the development of the project

In order to develop the study it has been necessary to implement the MSQG model (see section 3.1.2) within the project's BOOST-SWOT library. The model has been compiled in Python using SWIG tool¹. Due to compatibility problems between the already written assimilation routine in Python and the model compiled with SWIG, the model is called by the routine as a sub-process. This slows down the numerical integration because the model has to be reinitialised each time a new time evolution is computed, but avoids errors. The BOOST-SWOT library has also been updated to save computational time, such as improving the observation projection calculation algorithm and making it possible to save projections in a specific folder to be shared by several experiments.

In addition, a python toolbox has been developed² for the computation of the discretization and model calibration from NATL60 output data, see section 3.4. This toolbox also lets splitting 3D data in several files and work with them to make the computation easy and fast in machines with low RAM memory. The toolbox is also used to interpolate the SSH data from NATL60 to validate the outputs, to compute the vertical mean values of the 3D velocity profile and to generate the topography file from the bathymetry values of NATL60. This library is still under development, examples and documentation will be added during the following weeks.

A large number of experiments have been carried out, mainly to study the response of the model

¹Simplified Wrapper and Interface Generator (SWIG): <http://swig.org>

²Toolbox for the calibration of MSQG model: https://github.com/enekomartinmartinez/msmq_tools

and its characteristics. Initially, tests have been done with experiments initialised with NATL60 data but without assimilation. Then, studying the evolution of the model from a steady state using regular forward nudging. Finally, using the BFN algorithm with different windows.

The total number of experiments exceeds 50, and their computation time varies according to the experiment. A BFN experiment for the two-layer model with a 256x256 grid in a 15-day window initialised from a steady state takes between 5 and 11 hours, without taking into account the time to project the satellite observations. While the experiments used in the report have taken about 14 hours each, without the time for observation projection.

