



HAL
open science

Assimilation des dynamiques spatio-temporelles de la turbidité par synergie entre mesures satellitaires de la couleur de l'eau et simulations hydrodynamiques

Jean-Marie Vient

► **To cite this version:**

Jean-Marie Vient. Assimilation des dynamiques spatio-temporelles de la turbidité par synergie entre mesures satellitaires de la couleur de l'eau et simulations hydrodynamiques. Océanographie. Université de Bretagne occidentale - Brest, 2022. Français. NNT : 2022BRES0103 . tel-04146113

HAL Id: tel-04146113

<https://theses.hal.science/tel-04146113>

Submitted on 29 Jun 2023

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 DE DOCTORAT DE

L'UNIVERSITÉ
DE BRETAGNE OCCIDENTALE

ÉCOLE DOCTORALE N° 598

Sciences de la Mer et du littoral

Spécialité : *Observation de l'Environnement marin et Traitement de l'Information*

Par

Jean-Marie VIENT

**Assimilation des dynamiques spatio-temporelles de la turbidité
par synergie entre mesures satellitaires de la couleur de l'eau et
simulations hydrodynamiques**

Thèse présentée et soutenue à Institut Universitaire Européen de la Mer, Plouzané, France, le 8 décembre 2022

Unité de recherche : Geo-Ocean UMR6538

Rapporteurs avant soutenance :

Aida ALVERA-AZCARATE

Maître de Conférence, Uliege, GHER, Liège (Belgique)

Audrey MINGHELLI

Maitre de conférence (HDR), LIS, SIIM, Toulon

Invité(s) :

Cécile BOLLEY (Tutorat DGA - Invitée)

Architecte technique, DGA, AID, Paris

Composition du Jury :

Thomas CORPETTI (Président du Jury)

Dir. de Recherche CNRS, Univ-Rennes 2, LETG, Rennes

Aida ALVERA-AZCARATE (Rapportrice)

Maître de Conférence, Uliege, GHER, Liège (Belgique)

Audrey MINGHELLI (Rapportrice)

Maitre de conférence (HDR), LIS, SIIM, Toulon

Malik CHAMI (Examinateur)

Professeur, Sorbonne Université, LATMOS, Nice

Héloïse MULLER (Examinatrice)

Chercheuse, IFREMER, DYNECO, Plouzané

Christophe DELACOURT (Direction)

Professeur, UBO, Geo-Ocean, Plouzané

Ronan FABLET (Co-Direction)

Professeur, IMT-Atlantique, Lab-STICC, Plouzané

Frédéric JOURDIN (Encadrement)

Ing. recherche, SHOM, SEDIM, Brest

REMERCIEMENT

Il est toujours difficile de bien réussir ses remerciements, clôturant pour moi la rédaction, cette page à mis longtemps avant d'être commencée. L'heure tardive, ou matinale tout dépend, fera que j'oublierai sans doute des personnes très importantes et je m'en excuse par avance.

Je souhaite remercier tout d'abord les institutions ayant permis la mise en oeuvre de cette thèse, Brest Métropole Océane et l'Agence de l'Innovation de Défense (DGA), merci à Cécile Berron tutrice pour la DGA de cette thèse.

Je voudrais remercier mes co-directeurs de thèses qui m'ont accompagné au cours de ses trois ans malgré mon autonomie parfois poussée à l'extrême. Merci pour la confiance accordée sur mon travail. Merci à Ronan qui m'a suivi depuis mon stage de fin d'études, merci de ta patience usée à me ré(ré)expliqué en vain des moyens pourtant très simples pour améliorer les modèles que je manipulais. Merci de m'avoir pris en main dans le monde des réseaux de neurones qui m'était inconnu et encore une fois merci de ta confiance sur ce projet.

Merci à Christophe pour ton enthousiasme sur cette thèse, et merci de m'avoir fait ouvrir les yeux sur les moyens de communiquer entre chercheurs de disciplines pas toujours connectées. Je garde un très bon souvenir de nos réunions/discussions autour d'un schéma pour savoir différencier la sortie de modèle de qui sera entrée d'un autre modèle. Merci de ta patience et de tes encouragements.

Un très grand merci à Frédéric, sans qui le travail serait d'une qualité bien inférieure. Merci de m'avoir épaulé pendant ces presque 4 ans (eh oui ! depuis le stage), merci pour tout le temps que tu as consacré pour m'apprendre l'océanographie, la couleur de l'eau et tant d'autres choses. Merci pour ton soutien constant et ton optimisme toujours au plus haut.

Merci aux membres du jury de thèse (et de CSI!), Héloïse, Malik, Thomas, d'avoir accepté d'évaluer les travaux issus de ma thèse, et tout particulièrement Aida et Aurélie qui ont accepté d'être rapportrices de mon manuscrit.

Je tiens à remercier toutes les personnes de l'IUEM et de l'IMT que j'ai pu croiser, recroiser, pour échanger des petits mots ou juste penser à autre chose. Merci à Margot et Véronique pour leur disponibilité devant toutes les urgences administratives auxquelles nous avons été confrontés ! Clin d'oeil à Christophe pour toutes ces discussions autour des ordis à propos d'ordis ou rien à voir.

Merci à tous les doctorants du -1 de la cave et d'ailleurs : Clarisse, Paul, Antoine, Léa, Noémie, Lucas, Juliette, Théo et tous les autres ! Je vous souhaite de tous arriver

à atteindre les buts que vous suivez. J'espère que mon bureau ne sera pas repris tout de suite pour laisser une table de ping-pong correcte!

Je voudrais remercier les copains qui m'ont soutenu de près ou de loin sur ce travail. Merci à Tim et Théo pour ses exils perrosiens , Yvan pour toujours avoir wouffé en moi, Brandy pour son passage éclair, Vincent pour ses calisses d'apéro avec Antoine , aux Bourguignons qui savent à quel pont ils comptent pour moi même si on ne se voit qu'une petite fois par an. Merci aux brestois d'adoption comme moi, Ben, Svet, Fanny et Féfé, Quentin, Eric, Manu et les filles maintenant je suis vraiment dispo pour prendre un verre chez Luc. Merci aux copains et copines du Water-Polo, je n'ai plus d'excuse pour le renfo!

Et enfin, merci à ma famille. Sans leur soutien, je ne serai arrivé à rien avec cette histoire. Papa et Maman, je sais que je n'appelle pas souvent (pas assez) mais je sais toujours votre confiance et votre volonté de me voir avancer, merci pour cela et pour tout le reste. C'est bon de se sentir soutenu en toute circonstance. Merci à Jean-Michel et Estelle pour vos petits (grands) mots d'encouragement et pour toutes les attentions lors de nos passages à La Rochelle, je vais pouvoir sérieusement me mettre à la soudure maintenant!

Victoire, je n'ai pas de mot pour te remercier de ton soutien pendant cette thèse. Malgré les moments de doutes, les difficultés et les questionnements, il y a une chose qui n'a pas changé c'est le fait de savoir la chance d'avoir été ton conjoint, et d'être maintenant ton fiancé. J'espère pouvoir te rendre ce que tu as donné pour moi pendant ces derniers moments et à mon tour t'aider dans tout ce que tu entreprendras!

Pour terminer, je souhaite dédier ce travail à ma Mamie. Je sais que l'éloignement et le temps à fait que nous n'avons pas pu passer autant de temps ensemble que durant mon enfance. Mais j'ai toujours su que tu veillais sur moi, j'espère que ce travail pourra te rendre fière même si tu n'es malheureusement plus là pour en voir la fin.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	19
1 État de l'art sur la turbidité	23
1.1 Définition de la turbidité	23
1.2 Turbidité et Concentration de Matière en Suspension (MES)	23
1.3 Importance de la turbidité	24
1.4 Matière en suspension	25
1.4.1 Matière organique	26
1.4.2 Matière minérale et concentration en sédiment	26
1.4.3 Floccs	27
1.5 Dynamique sédimentaire	28
1.5.1 Origine continentale des sédiments	29
1.5.2 Transport sédimentaire	30
1.5.3 Nature de fond et bathymétrie	31
1.5.4 Forçages et paramètres	32
1.5.4.1 Marée	32
1.5.4.2 Vagues	32
1.5.4.3 Courants de vent	32
1.5.4.4 Forçages anthropiques	33
1.6 Mesurer et modéliser la dynamique sédimentaire	34
1.6.1 Mesure de la turbidité in situ	34
1.6.2 Modélisation hydrosédimentaire	34
1.6.3 Observations spatiales	35
1.6.3.1 Télédétection de la couleur de l'eau	35
1.6.3.2 Restitution des composantes bio-optiques	37
1.6.3.3 Bilan d'incertitudes et corrections	38
1.7 Conclusion	39
2 Données dans le Golfe de Gascogne	41
2.1 Zone d'étude : Le Golfe de Gascogne	41
2.1.1 Introduction	41
2.1.1.1 Bathymétrie et géomorphologie	42
2.1.1.2 Grande Vasière	42
2.1.2 Processus physiques et dynamique du GdG	43

2.1.2.1	Marée	44
2.1.2.2	Vents	45
2.1.2.3	Circulation générale	46
2.1.2.4	Vagues	48
2.1.2.5	Apports continentaux côtiers	48
2.2	Produits disponibles	49
2.2.1	Bathymétrie	49
2.2.2	Coefficients de marée	49
2.2.3	Observations spatiales	50
2.2.3.1	Méthode pour obtenir la chlorophylle-a à partir des réflec- tances	50
2.2.3.2	Méthode pour obtenir les Particules Non-Algales (NAP) à partir des réflectances	51
2.2.3.3	Validation de l’algorithme et caractérisation des erreurs	52
2.2.4	Modélisation	54
2.2.4.1	Modélisation du vent et des vagues	54
2.2.4.2	Modèle hydrodynamique MARS3D	55
2.2.4.3	Module sédimentaire MUSTANG	55
2.2.4.4	Paramètres du Modèle MARS/MUSTANG	56
2.3	Conclusion	57
3	Reconstruction de données spatialisées	58
3.1	Méthodes d’interpolation	58
3.1.1	Géostatistique et Interpolation Optimale	59
3.1.2	Analyse en composantes principales et méthode DinEOF	60
3.1.2.1	Analyse en composantes principales	60
3.1.2.2	Méthode DinEOF	61
3.1.3	Assimilation de données	62
3.1.3.1	Notations et définition mathématique du problème	62
3.1.3.2	Approche stochastique : Filtre de Kalman et Analogues	63
3.1.3.2.1	Filtre de Kalman	63
3.1.3.2.2	Méthode d’assimilation suivant les analogues	63
3.1.3.3	Approche variationnelle avec la méthode 4DVar	64
3.2	Apport des réseaux de neurones	65
3.2.1	Fonctionnement d’un réseau de neurones	67
3.2.2	Assimilation variationnelle avec réseaux de neurones (4DVarNet)	69
3.2.2.1	Objectif et formulation	70
3.2.2.2	L’opérateur ϕ	71
3.2.2.3	L’intégration du solveur Γ	71

3.2.3	Conclusion	72
4	Résultats sur la reconstruction de données spatialisées simulées (OSSE)	73
4.1	Interpolation des SPIM dans le golfe de Gascogne (cas d'études OSSE) . .	73
4.1.1	Résumé	73
4.1.2	Abstract	74
4.1.3	Introduction	75
4.1.4	Case Study and Data	76
4.1.4.1	Data	76
4.1.5	Osse and Benchmarking Framework	79
4.1.6	Methods	80
4.1.6.1	Optimal Interpolation	81
4.1.6.2	DINEOF	81
4.1.6.3	AnDA	82
4.1.6.4	4DVarNet	82
4.1.6.5	GE-4DVarNet	84
4.1.7	Results	84
4.1.7.1	Metrics and Evaluation	84
4.1.7.2	Global Performance	85
4.1.8	Reconstruction of Time Patterns	87
4.1.9	Discussion	88
4.1.10	Conclusions	90
4.1.11	Materials	91
4.1.12	Appendix	91
4.1.12.1	Architecture of the Autoencoder Operator ϕ (AE-NN) . .	91
4.1.12.2	Architecture of the Gibbs-Energy Operator ϕ (GE-NN) . .	91
5	Résultats sur la reconstruction de données spatialisées satellites (OSE)	93
5.1	Résumé	93
5.2	Abstract	94
5.3	Introduction	95
5.4	Data	96
5.4.1	Area of Interest	96
5.4.2	MARS model simulations (for OSSE)	97
5.4.3	MODIS real satellite data (for OSE)	98
5.5	Methods	99
5.5.1	4DVarNet scheme	100
5.5.2	Training and evaluation framework	101
5.5.3	Performance metrics	102
5.5.4	Reference methods for comparison	103

5.6	Results	104
5.6.1	Global Performance	104
5.6.2	OSSE versus OSE comparaison	104
5.6.3	4DVarNet performance	106
5.7	Discussion	107
5.7.1	From OSSE to OSE	108
5.7.2	Comparison of interpolation methods	109
5.7.3	Retrieval of fine-scale turbidity patterns from satellite data	110
5.8	Conclusion	111
5.9	Material	111

6 Modèle de prévision 4DVarNet basé sur les observations pour la prévision à court terme de la SSSC 112

6.1	Résumé	112
6.2	Abstract	113
6.3	Introduction	113
6.4	Data	114
6.4.1	Bay of Biscay	114
6.4.2	Satellite data	115
6.4.3	Forcing data	115
6.4.3.1	Bathymetry	116
6.4.3.2	Tides	116
6.4.3.3	Waves	116
6.5	Methods	117
6.6	Proposed 4DVarNet scheme	117
6.6.1	Conditional 4DVarnets using physical forcing	118
6.6.2	Learning Scheme	118
6.7	Results	120
6.7.1	Metrics and evaluation strategy	120
6.7.2	Global results	120
6.7.3	Forcing Sensitivity	123
6.7.4	Seasonality and observation rate	124
6.8	Discussion	125
6.8.1	From Interpolation to Forecast	126
6.8.2	Input relevance	128
6.9	Conclusion	130
6.10	Material	130

Conclusion générale 131

TABLE DES FIGURES

1.1	Classification des particules d'après Gorokhovich (2016)	25
1.2	Classification des particules minérales de Wenworth (1924) d'après Rivier (2013)	27
1.3	Cycle de floculation de sédiments, image d'après Verney et al. (2006) Le cycle inclut l'ensemble des processus en cours lors de la remise en suspension de particules.	28
1.4	Récapitulatifs des différents facteurs à l'origine des processus hydrodynamiques appliqués aux sédiments	29
1.5	Schéma récapitulatif du processus d'advection de saltation et de charriage selon l'intensité de la tension de frottement au fond d'après Mengual (2016)	31
1.6	Schéma du signal mesuré par le capteur satellitaire. L'épaisseur relative des flux montre l'importance de la part atmosphérique dans le signal mesuré (souvent plus de 80%).	36
1.7	Exemple de disponibilité mensuelle des données contraintes par la couverture nuageuse pour le mois de mars. Données réalistes de couverture nuageuse d'après Météosat Seconde Génération pour l'année 2007, appliquée à une acquisition par les deux satellites défilants Sentinel-3/OLCI (Antoine, 2016).	40
2.1	Bathymetrie du Golfe de Gascogne d'après les paramètres du Modèle MARS-MUSTANG Mengual (2016). La ligne blanche épaisse (correspondant à l'isobathe de 180 m) délimite approximativement le bord du plateau. . . .	43
2.2	Projection 2D des vitesses des courants de marée calculées sur 10 ans (2021-2020). Données issue de la base de données SHOM.	44
2.3	Roses de vent annuelles pour 3 points situés au nord (a), au centre (b) et au sud (c) dans le golfe de Gascogne (de gauche à droite). (Source : Météo-France, 2007).	46
2.4	Représentation schématique de la circulation de surface dans le Golfe de Gascogne modifiée d'après Oms (2019). a. Circulation générale de l'Atlantique Nord ; b. Tourbillons anticycloniques ; c. Courant de pente ; d. Courant résiduel de surface ; e. Courants de marée ; f. Courants induits par les vents ; g. Courants de densité induits par les apports d'eau douce.	47

2.5	Validation de la "Look Up Table" de Gohin (2011) de l'algorithme de traitement des réflectances pour la concentration en SPM. Les noms des points correspondent à plusieurs campagnes de mesures in situ effectuées en GdG	52
2.6	Cycles annuels de la MES non-algale aux 6 stations de la Manche où elle est mesurée (Gohin, 2011) : comparaisons entre les données in situ et satellite MODIS. L'échelle de temps est exprimée en quinzaine de jours	53
2.7	Moyenne annuelle (a) et P90 (b) de la turbidité MODIS et in situ durant la période productive.	54
3.1	Principe du filtrage en assimilation de données d'après Simon (2007). Les points verts correspondent aux observations, la trajectoire noire à celle du modèle et les trajectoires bleues aux différentes séquences de reconstruction selon le filtre	64
3.2	Méthodes des analogues successeurs à partir d'un signal d'observation bruité. La prédiction s'effectue en fonction des observations (étoiles) et de leurs incertitudes associées. D'après Lguensat et al. (2017)	65
3.3	Assimilation par le 4DVar d'après Simon (2007). Les points verts correspondent aux observations, la trajectoire noire à celle du modèle et les trajectoires bleues aux périodes d'assimilation des données. La section violette correspond à la trajectoire du modèle de prévision	66
3.4	Schéma représentatif des étapes principales d'apprentissage par un réseau de neurones. Les éléments bleus sont relatifs aux entrées de modèle, le rouge relatif aux sorties. Le vert comprend l'architecture du modèle. Les étapes en jaune correspondent aux actions de rétropropagation.	69
4.1	(a) Bathymetry of the Bay of Biscay. Black lines represent isobaths 40, 70, 100, and 130 m. The thick white line (corresponding to the 180 m isobath) approximately delimits the shelf edge. (b) Mean spatial distribution of the log ₁₀ SSSC (g/L) from the MARS-MUSTANG hydrosedimentary model (from 2007 to 2011) (Mengual, 2016).	77
4.2	Comparison of daily satellite SSSC (Gohin, 2011) ($SSSC_{sat}$) with model results ($SSSC_{mod}$). (a) SSSC time series in mg/L (constrained by the daily frequency of satellite observations) along the 2007–2011 period, averaged over the 10–70 m bathymetric range of the area of interest plotted in (b). Time series on (a) are masked when the cloud cover is higher than 90% over the area of interest. (c) Correlations between modeled and observed SSSC, where continuous and red line refers to model underestimations (with respect to observations) by a factor of 2.	79

4.3	Illustration of key features of the considered OSSE dataset : (a) Map of pixel-wise available data rates for the simulated SSSC dataset, with, depicted in white, the location of the three reference stations named ‘SaO’, ‘Gas’, and ‘Con’. (b) Time series of the missing data rate for the simulated SSSC dataset. (c) Time series of the reference SSSC dataset (in green) for the three reference stations, and where black crosses are drawn when the pixel corresponding to each station is observed by the satellite.	80
4.4	Daily reconstruction RMSE for OI, DinEOF, AnDA, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet. Red bars indicate time periods having a daily missing data rate above 95%. Our simplified DinEOF method shows similar results as OI see section 4.1.6	86
4.5	Reconstruction of SSSC gradient fields : (a) reconstruction obtained by OI, AnDA, DINEOF, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet on average for the whole 100-day validation period. (b) map of the mean reconstruction error for the 100-day validation period for OI, DinEOF, AnDA, AEP-4DVarNet, and GE-4DVarNet. The shelf effect in the open sea visible in the DinEOF and AnDA results comes from the 0.1mg/l threshold described in Section 4.1.4.1	87
4.6	Time series of the SSSC reconstruction for OI, DinEOF, AnDA, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet. Green series refer to true state, mark to the observational term inputs. Locations refer to 4.1.8	88
5.1	Left) Bathymetry of the Bay of Biscay. Black lines represent isobaths 40, 70, 100, and 130 m. The thick white line (corresponding to the 180 m isobath) approximately delimits the shelf edge. Middle) Mean spatial distribution of SSSC (in mg/L) from the MARS-MUSTANG hydrosedimentary model (from 2007 to 2011) (Mengual, 2016). Right) Mean spatial distribution of SSSC (in mg/L) from MODIS observations for the same period.	100
5.2	Workflow of the proposed framework for the reconstruction NAP field with the 4DVarNet. A given observation dataset catalogue is provide for the learning phase of the model. The interpolator Φ is trained and optimised by the solver. Then the model is able to reconstruct the irregularly sampled time series input into the reconstructed data.	101
5.3	Different sampling strategy for validation by using missing observations : a) True observation from MODIS L2 image dataset b) Random points sampling strategy for observation sampling c) Patch sampling strategy for observation sampling	102

5.4	Reconstruction norm of SSSC gradient fields for the OSE (MODIS) and OSSE (MARS) application for the whole validation period : a) OSE configuration b) OSSE configuration.	107
6.1	Diagram of the forcing integration strategy in the 4DvarNet model. Auto-Encoder maps the considered forcings to lower-dimensionnal features fed to the 4DVarNet scheme to forecast the SSSC over a predefined horizon given past SSSC observations. NB : for simplification in the description of data pools, the Bathymetry (which is a state parameter) is included in the list of forcing parameters.	119
6.2	Reconstruction norm of SSSC gradient fields for the first 3 days of forecast for each forcing configuration	122
6.3	Violin diagram of forecasting range performance. Each diagram refers to a specific forcings configuration.a) Evaluation of forecast horizon series above 50% of EV. b) Evaluation of forecast horizon series higher than 75% of EV c) Evaluation of forecast horizon series higher than 90% of EV.	124
6.4	Violin diagram representing the prediction horizon density for each season of the reconstructed 2010 year. a) Evaluation of prediction horizon series greater than 50% of EV b) Evaluation of prediction horizon series greater than 75% of EV c) Evaluation of prediction horizon series greater than 90% of EV.	126
6.5	a)Plot of the input available observation rate for the year of 2010 for each day compared to the horizons of forecasts calculated for each threshold of EV for the AF configuration b)Scatter plot of the forecast horizon compared to the available observation rate in input.	127

LISTE DES TABLEAUX

2.1	Tableau récapitulatif des forçages utilisés pour l'initialisation du modèle MARS-MUSTANG	57
4.1	RMSE and R-score computed for all methods over the SSSC validation period : these scores are computed globally (All) and over the observed data (Observed) and the missing data (Unobserved) patterns.	85
4.2	Mean RMSE and R-score for the norm of the SSSC gradients computed for all methods over the 100-day validation period.	87
5.1	R-score performance in % for the considered methods and validation configurations. OSE refers to the real data (MODIS) interpolating process. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS results.	105
5.2	RMSLE performance in $\log_{10}[\text{mg/L}]$ for the considered methods and validation configurations. OSE refers to the real data (MODIS) interpolating process. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS results.	105
5.3	Evolution of accuracy, from OSSE to OSE, in the form of a performance rate according to the formula $1 - \text{RMSLE}(\text{OSE}) / \text{RMSLE}(\text{OSSE})$ expressed in percentage, with using the RMSLE reported in Table 5.2	105
5.4	Evolution of accuracy, from OI or DINEOF to 4DVarNet, in the form of a performance rate according to the formula $1 - \text{RMSLE}(4\text{DVarNet}) / \text{RMSLE}(\cdot)$ expressed in percentage, with using the RMSLE reported in Table 5.2	106
5.5	RMSE and R-score computed for all methods over the SSSC validation period : these scores are computed globally (All) and over the observed data (Observed) and the missing data (Unobserved) patterns.	106
5.6	Gradient norm reconstruction performance R-score evaluation for different methods and validation configurations in %. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS/MUSTANG results in an OSSE application. MODIS dataset refers to the real data interpolating process, with learning based only on observations. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2.	107

6.1 RMSLE, EV, and Bias calculated for the first day of forecast for all forcing configuration. T for True means that the forcing is integrated in the learning scheme and in the forecast input. F stands for False. 121

6.2 RMSLE, EV, and Bias calculated for the fifth days of forecast for all forcing configuration. T for True mean that the forcing is integrated in the learning scheme and in the forecast input. F stands for False. 121

ABRÉVIATIONS

Les abréviations utilisées dans ce travail sont compilés ci dessous :

ARPEGE	Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle
BoB	Bay of Biscay
CMEMS	Copernicus Marine Environment Monitoring Service
DINEOF	Data INterpolating Empirical Orthogonal function
EOF	Empirical Orthogonal function
HIGHROC	HIGH spatial and temporal Resolution Ocean Colour products and services
IBI	Iberian-Biscay-Ireland
IPC	Iberian Poleward Current
LSTM	Long Short Term Memory
MARS	Model for Applications at Regional Scales
MODIS	Moderate-Resolution Imaging Spectroradiometer
MUSTANG	MUd and Sand TrAnsport modelliNG
NAP	Non-Algal Particles
NN	Neural Network
NTU	Nephelometric Turbidity Unit
OI	Optimal Interpolation
OLCI	Ocean and Land Colour Instrument
OSE	Observing System Experiment (real data)
OSSE	Observing System Simulation Experiment (simulated data)
RMSE	Root Mean Square Error
RMSLE	Root Mean Square Logarithm Error
SPIM	Suspended Particulate Inorganic Matter
SSSC	(sea) Surface Suspended Sediment Concentration
VIIRS	Visible Infrared Imaging Radiometer Suite
4DVar	Four-Dimensional Variational data assimilation (model-driven)
4DVarNet	Four-Dimensional Variational (neural) Network data assimilation (data-driven)

INTRODUCTION

En raison de la multiplicité et la diversité des forçages interagissant, la dynamique océanographique est par essence 4D (3D spatial et temporel). Les enjeux liés à l'océanographie sont également multiples et agissent donc à des échelles spatiales et temporelles variées. Les récentes décisions institutionnelles, en faveur de l'approfondissement des savoirs en lien avec l'océanographie (Décennie des Nations Unies pour les sciences océaniques), se mettent en place dans le milieu scolaire. Un nombre croissant d'industries se tourne vers l'océan, conscient des apports et ressources potentiellement disponibles. Dans un contexte de changement global, avec des besoins énergétiques nécessitant de trouver des ressources alternatives, l'océan deviennent plus que jamais un nouvel enjeu, vecteur des développements à venir. Les zones côtières, où l'activité humaine est intense aussi bien en mer que sur terre, illustrent les enjeux de société auxquels nous sommes confrontés et pour lesquels il est important de développer notre capacité à comprendre et prévoir la façon dont notre milieu naturel évolue. Ces enjeux sont notamment de nature économique (pêche, navigation, champs pétrolifères off-shore, tourisme, etc..) où bien liés à des aspects de sécurité civile (ouragans, pollutions liées aux naufrages de super tanker, etc,..).

Le besoin en informations et données sur le domaine océanique s'accroît. Un des paramètres clé de caractérisation des océans est la turbidité, qui conditionne la transparence de l'eau qui agit sur la disponibilité de la lumière nécessaire à la photosynthèse, et a aussi un effet rétroactif sur le bilan thermique des couches de surface de l'océan via le transfert radiatif de la lumière solaire. La turbidité est la somme de différentes composantes de nature biologiques ou minérales qui ont des dynamiques distinctes et multifactorielles. Les composantes minérales principalement liées aux apports du continent sont fortement impactées par les activités humaines (activité de pêche, travaux portuaires, etc...), particulièrement présentes sur la façade atlantique française. C'est pourquoi il est primordial de comprendre leurs dynamiques à la surface de l'océan pour pouvoir anticiper les impacts du milieu.

La diminution des coûts des technologies informatiques en parallèle de l'accroissement des capacités de calcul sont à l'origine de leur démocratisation croissante, et nourrissent de grandes perspectives. Les données océaniques sont particulièrement volumineuses. Dans le domaine océanographique, il y a donc un double enjeu lié d'accroissement de connaissance et d'optimisation de traitement de volumes importants de données.

Les données océanographiques sont de différentes origines :

- Mesure *in-situ* : La première approche naturelle pour comprendre les océans est de mesurer directement au sein du milieu. Là aussi de nombreuses technologies voient le jour et relancent de nouvelles perspectives. Néanmoins les mesures *in-situ*, malgré des progrès importants sur la précision et l'efficacité des capteurs, ne peuvent permettre d'avoir une vision globale des dynamiques océaniques. Il est impossible de suivre un bassin océanique entier, et ces observations ont besoin d'être complétées par d'autres moyens.
- Modèles numériques : Une des approches classiques de la compréhension des dynamiques océaniques est l'utilisation des modèles numériques du système dont on cherche à prévoir les états. Les progrès réalisés dans le domaine de la caractérisation physique des environnements depuis quelques années sont en augmentation constante. Cependant, ces applications comportent encore de multiples erreurs. Celles-ci peuvent être liées aux approximations physiques qui sont réalisées dans ces modèles au travers des équations et conditions initiales. Elles viennent également du fait que les modèles numériques sont discrétisés. Leurs effets de bords dépendent à la fois des schémas numériques utilisés, ainsi que de la résolution du modèle. Cette limite peut toujours être repoussée grâce aux progrès en termes de performance de calculs.
- Mesures depuis l'espace : Une autre source d'informations des états de surface de l'océan sont les observations depuis l'espace. Après une période creuse, le nombre de satellites de mesure de la couleur de l'eau mis à disposition de la communauté scientifique n'a jamais été aussi nombreux. Avec le lancement du deuxième satellite européen Sentinel-3 (S3B) en mars 2018 ce sont actuellement six capteurs de la couleur de l'eau qui observent l'océan et fournissent des données aisément accessibles : deux capteurs MODIS, deux VIIRS et deux OLCI (sans compter les capteurs chinois, indiens, coréens et japonais). En Europe, OLCI, d'une résolution spatiale de 300 mètres, complète désormais les capteurs MSI des deux Sentinels-2 (S2) qui ont une résolution spatiale de 10 mètres pour l'observation du littoral dans le domaine visible. Avec un accès aisé (et gratuit) à une telle masse de données, associé à des capacités importantes de stockage et de traitement de l'information, la couleur de l'eau est susceptible de prendre une part plus importante dans l'océanographie opérationnelle.

Le principal obstacle à l'exploitation de l'imagerie satellite de l'océan est la couverture nuageuse. En effet, un capteur de couleur de l'eau est aveugle en cas de couverture nuageuse. Cette situation provoque des manques d'information sur la caractérisation de l'océan depuis le ciel et reste l'obstacle majeur à dépasser pour avoir une vision globale et continue des dynamiques océaniques.

Plusieurs méthodologies de reconstruction de données permettent de contribuer à palier à ce problème. Différentes méthodes statistiques permettent d’interpoler et de proposer des grilles complétées de manière algorithmique. Les méthodes d’assimilation de données (DA) proposent une approche basée sur la mise en relation des observations et prévisions de modèles associées à un signal bruité et partiel. Ainsi le modèle dynamique est corrigé lors de la reconstruction par des observations. Les méthodes de DA sont déjà utilisées dans des domaines proches de la transparence de l’eau, avec succès. Avec l’essor des applications de réseaux de neurones, de nouvelles perspectives apparaissent pour proposer des modèles de reconstruction toujours plus performants. En effet, depuis quelques années les approches basées sur les Réseaux de neurones ont montré une capacité redoutable à résoudre des problèmes physiques.

Ce travail s’inscrit dans la lignée de ces modèles émergents. Cette thèse explorera différents formalismes d’assimilation « dirigée par les données », notamment ceux basés sur des modèles statistiques, l’assimilation analogue (Lguensat et al., 2017) et les réseaux de neurones (Fablet et al., 2017). La pertinence de chaque formalisme sera évaluée vis-à-vis de son interopérabilité en termes de processus géophysiques (e.g., processus d’advection et diffusion) et de la capacité à fournir conjointement une reconstruction de la partie lithogène des particules en suspension.

L’objectif de cette thèse est d’évaluer le potentiel et les limitations des méthodes de reconstruction d’observations satellites des dynamiques spatio-temporelles des particules sédimentaires de surface aussi appelée particules non algales (NAP, pour ‘Non Algal Particles’).

Dans ce but, il s’agit dans un premier temps de dresser un état des lieux des méthodes de reconstruction d’observations satellites. Ces méthodes seront confrontées à un algorithme de ‘machine learning’ développé au Lab-STICC (dans le domaine de l’assimilation de données de type ‘data-driven’). Ce modèle sera évalué sur différentes configurations d’interpolation allant jusqu’à un apprentissage basé uniquement sur la donnée. Ces expériences permettront d’avoir une vision sur les capacités en termes de reconstruction des dynamiques spatio-temporelles des particules sédimentaires de surface. Cette méthode sera ensuite poussée au-delà de l’interpolation sera évalué en termes de prévision sur vingt jours des NAP. Ici il sera question de proposer une approche basée sur l’intégration de forçages au modèle et de visualiser les obstacles à passer pour optimiser les résultats avec ce type de modèle, encore peu caractérisé.

Le plan de cette étude est le suivant. Dans un premier temps, la problématique de la dynamique des sédiments en suspension à la surface de l’océan sera décrite. Cette partie sur l’état de l’art traitera également des moyens de la mesure et les limites associées (Chapitre 1). Ces informations seront utilisées pour décrire la zone du Golfe de Gascogne (GdG) sur laquelle porte ce travail. Un point sera fait sur les produits disponibles pour l’étudier (Chapitre 2). Ce travail s’attachera à décrire ensuite les méthodes mises en œuvre pour pallier aux problématiques soulevées (Chapitre 3). Ce chapitre abordera également les apports des réseaux de neurones dans ces applications et décrira la méthode 4DVarNet basée sur une architecture d’apprentissage machine. Trois cas d’applications feront chacun l’objet d’un chapitre. Le premier traitera d’un comparatif entre différentes méthodes d’interpolation appliquée à la reconstruction de sortie de modèle hydrosédimentaire dans le cadre d’une expérience de simulations d’observations (OSSE) (Chapitre 4). Le chapitre suivant présentera une application identique à la précédente, mais basée sur des données réelles sous forme d’observations satellites (Chapitre 5). Enfin, le dernier chapitre sera consacré à l’étude d’un problème de prévision des sédiments en suspension par la méthode basée sur les réseaux de neurones. Celle-ci sera complétée par l’ajout de forçages, et fera l’objet d’une caractérisation de l’importance de ceux-ci dans la reconstruction de données (Chapitre 6).

ÉTAT DE L'ART SUR LA TURBIDITÉ

Cette partie se propose de présenter les différents composants et paramètres influant sur la turbidité de l'eau. La description sera accompagnée d'un récapitulatif des techniques de mesures et présenter les facteurs influençant la turbidité. L'intérêt de la mesurer est de qualifier la profondeur Secchi (ZSecchi) qui permet de définir une profondeur de visibilité liée à la transparence de l'eau. Cette transparence de l'eau étant affectée par de nombreux facteurs, il sera ici question d'identifier les plus importants et les processus qui leur sont associés. Dans le cadre de cette thèse, le travail se concentre autour de la partie sédimentaire de la turbidité à savoir les Particules Non-Algales (NAP).

1.1 Définition de la turbidité

La turbidité caractérise la capacité d'un milieu à diffuser la lumière incidente. Dans l'océan, la turbidité est due à la présence dans l'eau de particules en suspension qui peuvent être d'origines minérales ou organiques. Ainsi, une eau plus chargée en particules sera qualifiée de plus turbide. Cependant, la turbidité ne possédant pas d'unité SI, son unité de mesure dépend du protocole appliqué.

Il existe deux unités principales. La première, et la plus ancienne est le NTU (Nephelometric Turbidity Unit, U.S.E.P.A.¹ 180.1). Cette unité correspond à une mesure optique de la diffusion à $90^\circ \pm 30^\circ$ d'un rayon lumineux incident dans la gamme 400-680 nm. La seconde unité est le FNU (Formazin Nephelometric Unit, ISO 7027). Celle-ci se mesure avec une lumière incidente à 860 nm ± 60 nm diffusée à $90^\circ \pm 2.5^\circ$. Même si par son ancienneté l'unité NTU est la plus utilisée, elle tend à être remplacée par la mesure FNU, plus précise. En effet un des biais de la NTU est d'être davantage sensible à la présence de substances organiques dissoutes colorées (matières jaunes).

1.2 Turbidité et Concentration de Matière en Suspension (MES)

Associées à une étape de calibration, les mesures de turbidité in situ permettent d'avoir une estimation des concentrations en MES (Matières en Suspension) en milieu marin, la-

1. United States Environmental Protection Agency

custre ou fluvial. Cette mesure quasi continue du milieu est possible grâce à une calibration du turbidimètre couplé à des mesures in-situ (Druine, 2018; Rymaszewicz et al., 2017). Ces mesures in-situ sont effectuées par prélèvements directs qui sont représentatifs des principaux événements hydrodynamiques (cycles de marée, saisonnalité, etc...). Une fois la mesure obtenue en unité NTU/FNU celle-ci est convertie en concentration de particules en suspension (CMES) (Duvert et al., 2010; Jafar-Sidik et al., 2017).

Cependant certains facteurs limitent la restitution des MES à partir des mesures optiques. :

- La taille des particules et leur forme font également varier les mesures NTU/FNU (Druine, 2018; Merten et al., 2014)
- Les particules agrégées ne sont pas visibles dans les mesures (voir 1.4.3) (Gibbs and Wolanski, 1992).

Il n'existe donc pas de relation fiable et universelle entre la turbidité et les concentrations en MES en milieu naturel puisqu'elle varie d'un environnement à un autre et peut être instable dans le temps.

1.3 Importance de la turbidité

La turbidité est un paramètre écologique important, la variabilité de ce paramètre étant à l'origine de changements sur le milieu à savoir la colonne d'eau. Ces modifications influencent à la fois les organismes vivants dans le milieu, mais également les activités humaines.

La turbidité est directement liée à la transparence de l'eau. En effet, des variations de turbidités provoqueront des variations de lumière disponible dans la colonne d'eau. Plus cette capacité de pénétration de la lumière est importante et plus l'eau est dite transparente. Cette mesure se traduit par une profondeur de visibilité.

La transparence de l'eau intervient dans l'ensemble des disciplines et applications liées à la navigation et à l'environnement marin. Elle présente un intérêt, aussi bien dans les activités à la surface de l'eau que sous-marine. Pour les plaisanciers, la transparence est à l'origine d'une eau limpide ou à l'inverse d'une eau à travers laquelle il est impossible de voir. De même en plongée sous-marine, la transparence de l'eau influe sur la distance de visibilité du plongeur.

La dynamique sédimentaire côtière détermine les fluctuations de turbidité. Elle conditionnent également le devenir d'un grand nombre de composés chimiques : contaminants, nutriments, ou éléments majeurs de l'écosystème comme le carbone. Elles contrôlent donc les écosystèmes côtiers et les échanges continent/océan en conditionnant la quantité d'énergie lumineuse (rayons du soleil) disponible pour les producteurs primaires dans la colonne d'eau et sur le fond. Il s'agit d'un indicateur environnemental majeur de la qualité de l'eau en général (Boyce et al., 2010).

Les enjeux liés à la prévision des modifications du milieu par la dynamique sédimentaire sont à l'origine de nombreux projets de recherche, dont l'objectif est principalement la mise en place de systèmes de modélisation régionale pour les courants, la houle et les flux sédimentaires, pour l'étude de la dynamique des flux sédimentaires, et l'étude des évolutions à long terme. Les principaux axes visés sont ceux en lien avec l'impact du changement climatique sur les taux de sédimentation et le recyclage du carbone, sur les niveaux de turbidité et les habitats en milieu côtier, sur les évolutions morpho-sédimentaires des domaines estuariens et littoraux (Doray et al., 2018; Mengual, 2016).

1.4 Matière en suspension

Dans la colonne d'eau, les MES désignent tout le matériel non dissout pouvant être observé en suspension dans l'eau, majoritairement à l'échelle microscopique. Différentes familles de MES sont caractérisées par leur spectre de tailles (définies par leur diamètre). Il est possible d'utiliser le terme particule si le diamètre d'une particule dépasse $0.2 \mu\text{m}$ (Gorokhovich, 2016) (Figure 1.1). Si son diamètre est compris entre 1 nm et $1 \mu\text{m}$, il s'agit d'une suspension colloïdale. En plus du type de particules, il est possible de la classer selon leur nature à savoir minérale (MM) ou organique (MO).

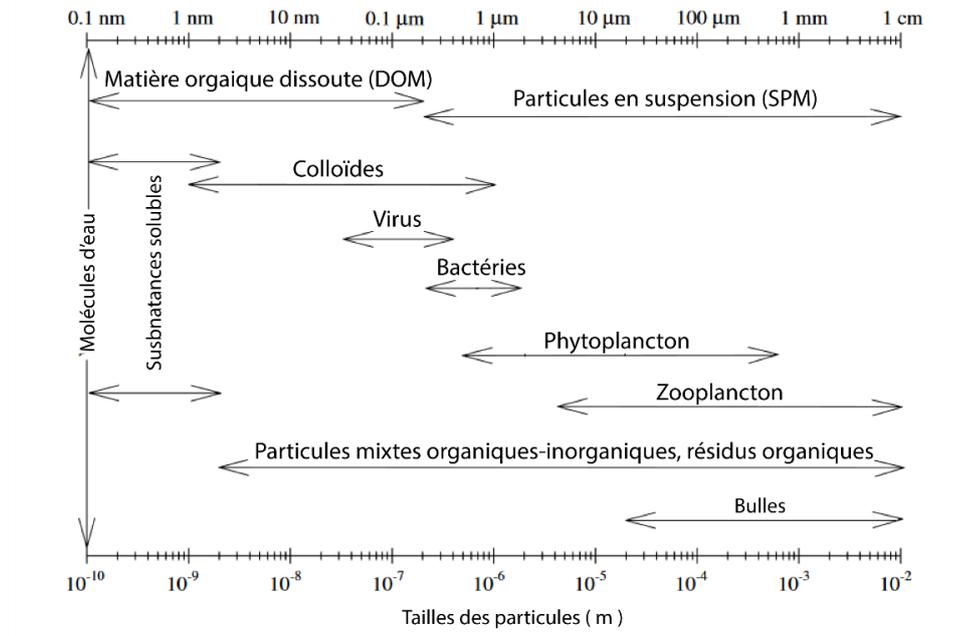


FIGURE 1.1 – Classification des particules d'après Gorokhovich (2016)

1.4.1 Matière organique

Les particules organiques en suspension comprennent différents types d'organismes. Il est possible d'observer tout d'abord les organismes de la production primaire. Ceux-ci proviennent principalement du phytoplancton. Ces organismes sont tributaires de leur capacité à utiliser l'énergie de la photosynthèse. Elles sont majoritairement présentes à la surface, pour avoir accès à une quantité suffisante de lumière. Il est à noter qu'en cas de luminosité trop importante, certains organismes utilisent une mécanique de protection, la photo-inhibition qui leur permet de diminuer la vitesse de la photosynthèse et ainsi se protéger de leur détérioration (Allard et al., 2003). Ces variations correspondent aux variations saisonnières (printemps) observées aux latitudes supérieures au tropique du Cancer. Lorsque cette production primaire est importante, elle est appelée efflorescence algale. Ce phénomène permet alors d'observer des concentrations de particules organiques en surface de l'eau modifiant de manière significative la transparence de l'eau. Un bloom est visible par observations satellites au travers de la mesure de l'absorption de la Chl-a (Morel and Prieur, 1977).

La production dite secondaire correspond aux organismes hétérotrophes, c'est-à-dire se nourrissant de la matière organique issue de la production primaire. (Tyrrell and Taylor, 1996). L'unité de mesure principalement utilisée pour quantifier la concentration en particules algales est la concentration chlorophylle-a (chl-a) issue des observations satellites de la couleur de l'eau.

1.4.2 Matière minérale et concentration en sédiment

Les particules d'origines minérales proviennent en majorité du transport jusqu'à l'océan des matériaux érosifs du continent. Cette érosion peut être fluviale ou de manière plus localisée aérienne. Les particules en suspension minérales sont regroupées avec les particules des composantes organiques par le terme MES (SPM en anglais), plus importantes dans des conditions plus proximales. Les sédiments ainsi transportés se déposent sur le fond par décantation. Ils sont ainsi potentiellement présents sur l'ensemble de la colonne d'eau (Pondaven, 2004). Des pics de concentration peuvent également être observés selon des rythmes saisonniers. De même, des variations des conditions de forçage peuvent provoquer épisodiquement des remises en suspension des sédiments au fond :

- Courant de fond combiné avec l'action des vagues
- Courant de turbulence provoqué par le vent

Les paramètres conditionnant cette remobilisation sont liés au type d'événements marins (houle, tempête), mais aussi selon le type de sédiments reposant sur le fond (Milliman et al., 1985).

Au même titre que pour la matière organique, il existe différentes classifications de la matière minérale. Dans le cadre de cette thèse sera utilisée celle de Wentworth (Rivier,

2013) qui propose quatre familles basées sur la taille des sédiments présents dans la colonne d'eau (Figure 1.2). Cependant, il est à noter que cette classification ne dissocie pas les particules des colloïdes (Figure 1.2). La première regroupe une catégorie grossière, demandant des fortes contraintes pour être remise en suspension, et avec une chute rapide. Une seconde avec un sable peu cohésif et donc plus facile à remobiliser. Puis une catégorie d'argiles, cohésive, mais très longue à retourner au fond en cas de remise en suspension avec des conditions de décantation définie (Mengual, 2016). Cette classification est la plus facilement compatible avec les observations satellitaires qui se focalisent surtout la turbidité. Ainsi les concentrations déterminées sont plus sensible au particules fines (voir Section 1.6.3).

Millimètres (mm)	Micromètres (μm)	Phi (ϕ)	Classe de Wentworth	Type de roche
4096		-12.0	Blocs	Conglomérats ou Brèches
256	-----	-8.0	Galets	
64	-----	-6.0	Graviers	
4	-----	-2.0	Gravillons	
2.00	-----	-1.0	Sable très grossier	
1.00	-----	0.0	Sable grossier	Sables et Grès
1/2	----- 500 -----	1.0	Sable moyen	
1/4	----- 250 -----	2.0	Sable fin	
1/8	----- 125 -----	3.0	Sable très fin	
1/16	----- 63 -----	4.0	Silt grossier	
1/32	----- 31 -----	5.0	Silt moyen	
1/64	----- 15.6 -----	6.0	Silt fin	
1/128	----- 7.8 -----	7.0	Silt très fin	
1/256	----- 3.9 -----	8.0	Argile	Argilites
0.00006	0.06	14.0		

FIGURE 1.2 – Classification des particules minérales de Wenworth (1924) d'après Rivier (2013)

1.4.3 Floccs

Les mécanismes de floculation (agrégation)(Figure 1.3) favorisent le regroupement dynamique des particules de formes, de tailles et de densités variables sous forme d'agrégats ou de floccs plus ou moins complexes (Verney et al., 2006; Winterwerp, 2002). Ces processus, également observés dans les rivières, sont particulièrement intenses en estuaire en raison des divers gradients physico-chimiques (concentrations en MES, salinité et forces inter particulaires), hydrodynamiques (turbulence de l'écoulement) et biologiques (populations phytoplanctoniques ou bactériennes) contribuant à intensifier les mécanismes d'agrégation. En fonction de différents facteurs favorisant l'agitation, la collision et la

cohésion des particules, les particules élémentaires (de quelques μm) peuvent s'agréger et former deux types de populations, les micros (inf. à $100 \mu\text{m}$) et macro-flocs (sup. à $100 \mu\text{m}$ jusqu'au mm) (Rivier, 2013).

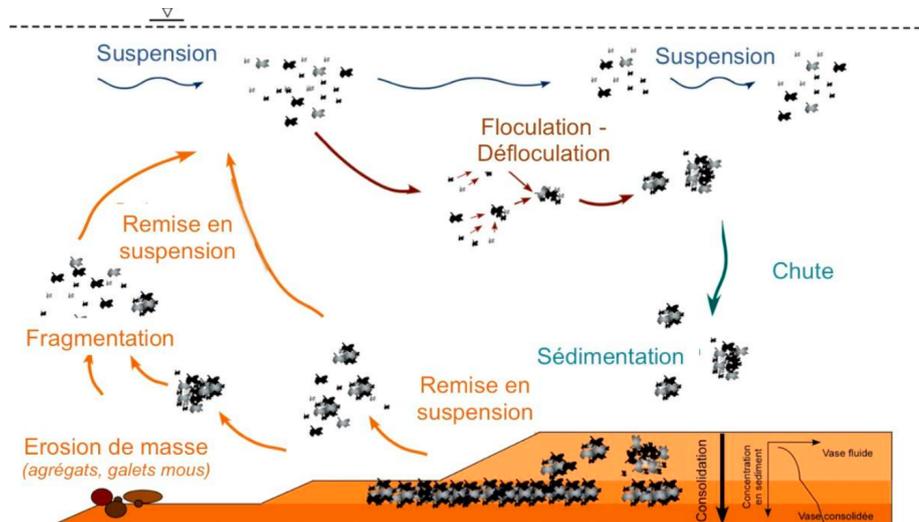


FIGURE 1.3 – Cycle de floculation de sédiments, image d'après Verney et al. (2006) Le cycle inclut l'ensemble des processus en cours lors de la remise en suspension de particules.

1.5 Dynamique sédimentaire

Dans l'océan les MES d'origines minérales ou biologiques subissent des contraintes mécaniques liées au milieu qui vont provoquer le déplacement des particules. Elles peuvent alors être soulevées depuis le fond dans un processus de remise en suspension, déplacées par des courants intermédiaires dans la colonne d'eau ou transportées à la surface de l'océan. Ces phénomènes agissent à toutes échelles spatiales et temporelles. De même, leurs influences seront plus ou moins fortes en fonction de la distance à la côte ou selon la bathymétrie locale. Les différentes sources de déplacement de particules aussi appelé forçages océaniques seront présentées dans cette partie. La figure 1.4 propose un diagramme synthétique des différents composants de la dynamique sédimentaire. Deux types de forçages se distinguent : les forçages d'origine naturelle et les forçages d'origine humaine, dits anthropiques.

Pour les premiers, il s'agit des impacts des facteurs physiques : apports par les fleuves (piégeage dans certains secteurs côtiers), estuaires, zones à forts courants entraînant une érosion du fond, souvent accélérées en présence de canyons sous-marins (avec courants de turbidité).

Pour les seconds, il s'agit de l'impact des activités humaines sur le milieu. Les activités de pêche, mais aussi les extractions de granulats ou infrastructures portuaires ont un impact pouvant modifier les conditions de dynamiques sédimentaire. Des organismes sont

chargés de les quantifier et de les évaluer. Pour cela la DCSMM² exige d'une part de quantifier les effets de ces activités (extractions de granulats, rejets de dragages, chalutage), mais également d'en évaluer le degré de nuisance au regard de la situation initiale (situation supposée sans forçages anthropiques). C'est pourquoi il est important de bien connaître les forçages physiques naturels dans un premier temps, pour mieux définir les impacts des forçages anthropiques dans un second temps.

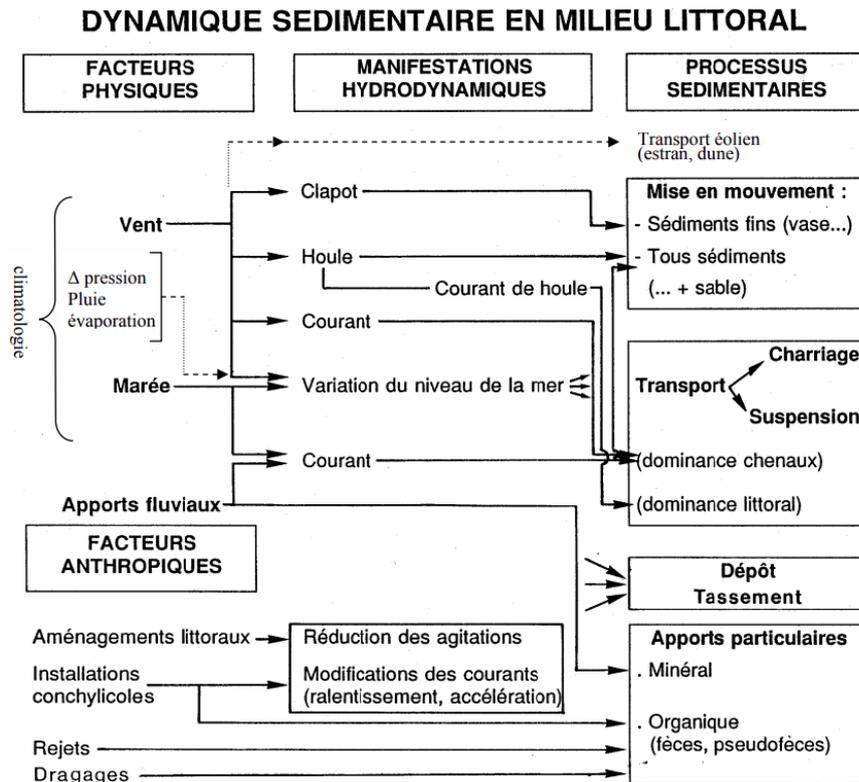


FIGURE 1.4 – Récapitulatifs des différents facteurs à l'origine des processus hydrodynamiques appliqués aux sédiments

1.5.1 Origine continentale des sédiments

D'un point de vue global, les sédiments provenant des bassins versants drainés par les cours d'eau constituent une des sources principales de sédiments déversés dans les océans (Syvitski et al., 2005). Les particules sont transportées par les fleuves jusqu'aux estuaires, lesquels agissent comme filtre réactionnel susceptible de modifier les flux bruts qui sont finalement déversés dans l'océan. Lors de ce cheminement, de nombreux processus viennent augmenter ou réduire le stock de matériel transporté et influencer le bilan sédimentaire dans la zone intra-estuarienne.

2. Directive Cadre Stratégie pour le Milieu marin

Le flux net de sédiments déversé dans les océans sur la planète est estimé à environ 12,6 Gt/an (Syvitski et al., 2005). Cette estimation se base sur une approche combinant données mesurées et résultats de modèle. À partir des bases de données existantes rassemblant les principaux fleuves du monde, des relations entre flux de MES et caractéristiques du bassin versant sont ainsi établies et permettent de calculer, par extrapolation, un flux global à l'océan. Les paramètres pris en compte sont notamment la surface de drainage du bassin versant, le relief et le ruissellement, mais également l'impact de la géologie sur les flux de sédiments. En règle générale, plus le bassin versant est étendu, ses reliefs montagneux et sa température moyenne élevés, plus sa charge en sédiment sera élevée. Cependant, des facteurs géologiques régionaux comme le type de sol érodé peuvent aussi influencer la quantité de sédiments transportée. Par exemple, le débit liquide du fleuve Jaune, deuxième fleuve le plus long de Chine, correspond à environ 1/15^{ème} de celui du Mississippi et 1/183^{ème} de celui de l'Amazone, alors que sa charge sédimentaire est 3 fois celle du Mississippi et 2 fois celle de l'Amazone (ping Chen et al., 2020). Ceci s'explique par le fait que le fleuve Jaune traverse le plateau de Loess, dont le sol est très peu consolidé et sur lequel le fleuve puise la majeure partie de sa charge solide.

1.5.2 Transport sédimentaire

Deux modes de transport des particules mises en mouvement sont en général distingués. :

- Le transport par charriage (terme anglo-saxon : bedload transport), à proximité du fond. Les grains se déplacent alors par glissement, par roulement ou par sauts (saltation). Leur vitesse de déplacement est très inférieure à la vitesse du fluide. La couche de charriage est supposée avoir une épaisseur de la taille de quelques grains. Lors d'un transport sélectif (les plus grosses particules ne sont pas en mouvement), la présence de grains immobiles freine le transport des particules en mouvement : ils représentent un obstacle physique à la progression et génèrent des recirculations locales à l'aval qui se traduisent par des figures de sillage caractéristiques.
- Le transport en suspension, lorsque les particules ne sont plus en contact avec le fond. Pour ce mode de transport, la chute des grains est alors compensée par la diffusion verticale associée à la turbulence de l'écoulement. Il est considéré que les grains en suspension se déplacent à la vitesse du fluide.

Dans la nature, les deux modes de transport peuvent coexister en affectant des populations de particules différentes (Figure 1.5). Selon l'intensité de frottement et la taille des particules, une même dynamique océanique peut provoquer simultanément du charriage et de la remise en suspension. La mobilité des particules de tailles importantes nécessite des pentes élevées ou des conditions hydrauliques extrêmes. Simultanément, l'épaisseur de la couche de saltation augmente jusqu'à ce que les grains soient transportés en suspension

dans toute la colonne d'eau.

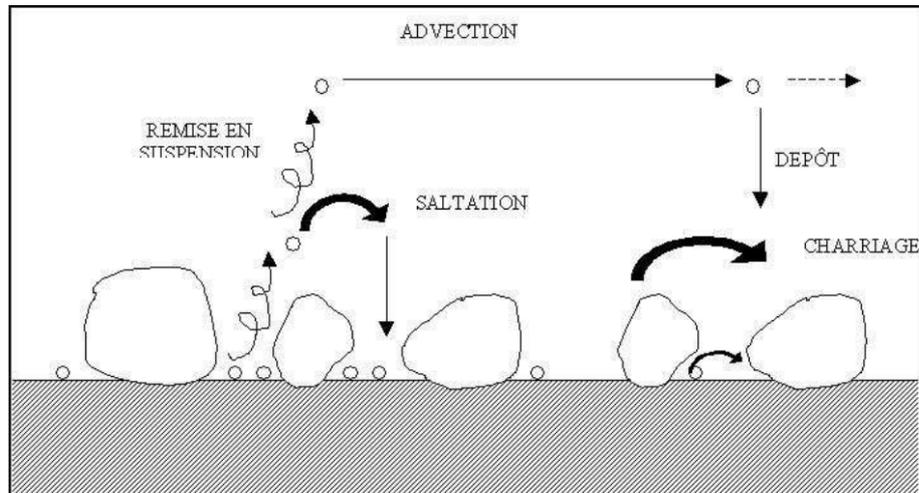


FIGURE 1.5 – Schéma récapitulatif du processus d'advection de saltation et de charriage selon l'intensité de la tension de frottement au fond d'après Mengual (2016)

Le mouvement des sédiments sera aussi influencé par la topographie du fond. Une pente dans le sens du courant va modifier l'intensité du transport : l'augmenter si la pente est dans le sens de l'écoulement, la diminuer si la pente s'oppose à l'écoulement. Une pente transversale va provoquer une déviation du transport par rapport à la direction de l'écoulement.

1.5.3 Nature de fond et bathymétrie

Dans les systèmes côtiers, la géométrie (bathymétrie) et la nature des fonds sont des paramètres cruciaux pour la connaissance de la dynamique sédimentaire. Ces paramètres agissent sur la réaction des particules aux différents forçages. Un gradient de densité est défini, permettant de dimensionner la capacité d'une particule à subir les autres forçages. Un grain fin sera plus sujet à être déplacé qu'un grain grossier qui lui décantera plus vite. La cohésion est également un critère important, un sédiment non-cohésif (sable) sera plus facilement remis en suspension qu'un sédiment fin cohésif. Ainsi même s'il est plus facile de mettre en suspension un sable grossier (non-cohésif) celui-ci sera plus rapide à retomber au fond. À l'inverse, une argile très cohésive demandera des efforts plus importants pour être remobilisée, mais aura un cycle de décantation plus long. Au large, la bathymétrie donne des informations sur les reliefs qui peuvent être à l'origine de circulation et érosions des fonds marins soumis aux courants océaniques (Tecchiato et al., 2015). Enfin la bathymétrie peut servir d'indicateur de mouvement de sédiments. Une des méthodes les plus directes pour réaliser un bilan sédimentaire consiste à comparer des cartes bathymétriques de différentes années. Un bilan des masses importées ou exportées annuellement par l'estuaire

s'établit par différence entre masse apportée en amont de l'estuaire et masse sédimentée ou érodée dans l'estuaire (Grochowski et al., 1993).

1.5.4 Forçages et paramètres

Le terme forçages physiques qualifie l'ensemble des processus océaniques influençant la dynamique des sédiments au fond et en surface.

1.5.4.1 Marée

Les marées sont causées par la combinaison des forces gravitationnelles de la Lune et du Soleil et des forces d'inertie dues à la rotation de la Terre. Elles se caractérisent notamment par une variation de hauteur des océans. Les variations du niveau de la mer liées à la marée induisent des courants horizontaux appelés barotrope. La force et la direction de ces courants varient selon l'instant de la marée, la bathymétrie (relief du fond marin) et la topographie du littoral (Peine et al., 2009; Ribbe and Holloway, 2001). L'onde de marée de plus grande amplitude au large des côtes françaises est la marée principale lunaire semi-diurne M2, qui est aussi perceptible dans tous les océans. Les courants induits par les marées font partie des principaux processus de mélange dans l'océan, ce qui explique pourquoi il est l'un des axes de recherche majeur de la dynamique des océans à l'heure actuelle (Guillou et al., 2017).

1.5.4.2 Vagues

Les vagues sont un ensemble de phénomènes oscillatoires provoqués par le frottement du vent sur la surface de l'eau. Les deux principaux phénomènes identifiés étant la mer de vent et la houle. La houle est constituée de vagues dont l'origine est lointaine (la mer est agitée alors qu'il n'y a pas de vent local). La forme oscillatoire des vagues est définie par sa période et sa longueur d'onde, son amplitude et sa vitesse de déplacement. Les vagues engendrent des courants alternatifs susceptibles d'entraîner l'oscillation des particules solides si leur vitesse est supérieure à la vitesse critique d'entraînement des sédiments (Berni, 2011). Lorsque la profondeur est faible, les orbitales se déforment et deviennent elliptiques. Quand la profondeur devient très faible, comme sur une plage, la vague va se déformer. La partie supérieure se déplaçant plus vite que celle frottant sur le fond, la vague se casse ou déferle en produisant une libération d'énergie (BERTIN and DODET, 2010).

1.5.4.3 Courants de vent

À la surface de la mer, le vent entraîne les couches d'eau superficielles qui par viscosité vont transmettre une partie de leur mouvement aux couches plus profondes : c'est le

courant de vent ou courant de dérive. Un ordre de grandeur raisonnable de l'intensité des courants de dérive (i.e. leur vitesse) est d'environ 3% de la vitesse du vent en dehors des phénomènes exceptionnels comme les cyclones (He et al., 2015). En milieu côtier, la proximité de la barrière physique que constitue la terre introduit une discontinuité dans le transport induit par le vent et a pour effet, selon la direction dans laquelle souffle le vent, de faire remonter du fond à la surface des eaux profondes (upwelling) ou au contraire d'entraîner vers le fond (downwelling) des eaux de surface. Il est à noter que le phénomène d'upwelling conduit à de fortes résurgences localisées. De manière générale, l'action du vent sur la remise en suspension des sédiments est principalement significative à l'embouchure des estuaires où les agitations peuvent influencer la morphodynamique de l'embouchure (Mengual, 2016).

1.5.4.4 Forçages anthropiques

Certaines activités humaines sont à l'origine de variations de la turbidité marine et nécessitent d'être correctement évaluées afin de préserver le milieu marin tout en permettant une activité d'exploitation pérenne.

Parmi les facteurs anthropiques influençant la dynamique sédimentaire, les activités de pêche sont reconnues par la communauté scientifique internationale comme un forçage majeur contribuant tant à la remise en suspension de sédiments (Durrieu De Madron et al., 2005; Ferré et al., 2008; Paradis et al., 2021) qu'à l'altération des fonds marins (Mengual et al., 2019). En effet, l'action mécanique exercée par les engins de pêche sur le fond de la mer est à l'origine d'une remise en suspension sédimentaire significative pouvant intervenir dans des environnements plus profonds où l'influence des forçages naturels est moins régulière (Mengual et al., 2017). Aujourd'hui, l'impact du chalutage de fond est reconnu comme étant le facteur anthropique le plus influant et impactant à l'échelle des plateaux continentaux du monde entier (Paradis et al., 2021). Plus proche de la côte, les activités de dragage et portuaires modifient aussi la turbidité locale.

Cette dynamique sédimentaire se traduit par des transferts de sédiments le long de la côte ou entre la côte et le large, dont les résultantes s'expriment en termes d'érosions et de dépôts, ou en termes de modification de la nature des fonds par envasement. Classiquement, cette dynamique aboutit à des zones d'accumulation de sédiments dans les zones calmes (e.g. zones lagunaires, baies) et au contraire à des zones préférentiellement érodées notamment le long des côtes ou au niveau des zones exploitées par l'homme.

Ainsi ces activités humaines sont susceptibles d'amplifier le phénomène d'érosion des côtes, déjà naturellement induit par l'action conjointe des vents, de la houle, et des courants (Borja et al., 2010).

1.6 Mesurer et modéliser la dynamique sédimentaire

Observer la dynamique sédimentaire impose de réaliser des mesures avec des résolutions spatiales et temporelles variées nécessitant de combiner mesures in situ (localisées) ou spatiales (satellites), le tout combiné avec la modélisation qui permet une vue d'ensemble.

1.6.1 Mesure de la turbidité in situ

De nombreux dispositifs in situ peuvent être mis en place afin de mesurer ponctuellement des flux de sédiments. Ainsi, les néphélomètres peuvent être placés sur des stations fixes, afin de donner des mesures régulières, ou bien sur des dispositifs mobiles. Il peut s'agir de capteurs embarqués sur des bâtiments lors de campagnes scientifiques. Il existe aussi des outils autonomes, dont notamment les gliders, capables de suivre une trajectoire prédéfinie, tout en permettant d'obtenir de nombreuses mesures de variables océaniques, dont la turbidité (Pennucci et al., 2003). Néanmoins, de telles mesures sont relativement lourdes à mettre en place et ne peuvent raisonnablement pas échantillonner toute une région, et sur de longues périodes de surcroît. C'est pourquoi une approche hybride peut également être adoptée, qui consiste à combiner plusieurs techniques pour évaluer des flux sédimentaires (Gohin et al., 2020). Les courants, calculés par les modèles hydrodynamiques 3D, sont en général assez précis et peuvent être combinés aux mesures de concentrations en MES in-situ pour estimer des flux à partir de mesures ponctuelles.

1.6.2 Modélisation hydrosédimentaire

Les contraintes liées à la ponctualité des mesures in-situ, notamment liées à la difficulté de mesurer l'importante variabilité des processus régissant le transport sédimentaire sur des échelles de temps et d'espace variables, ainsi que le constant essor de nouveaux moyens numériques de plus en plus performants, ont entraîné un intérêt tout particulier pour la modélisation numérique hydrosédimentaire. Une approche s'appuie sur la résolution des équations hydrodynamiques du mouvement des masses d'eau, et permet de calculer des courants en tenant compte de différents forçages (marée, météo). Les modèles utilisés s'appuient classiquement sur un « cœur » hydrodynamique fournissant les champs de courant et les contraintes de cisaillement au fond, couplé à un modèle de transport, qui reproduit les concentrations en MES dans la colonne d'eau et dans un compartiment sédimentaire, ainsi que les échanges de sédiments entre les deux compartiments (Mengual, 2016).

Lors de la modélisation, le mouvement du sédiment peut être suivi de deux façons. De manière lagrangienne, la trajectoire empruntée par chaque particule définie de manière distincte est enregistrée (de Souza Machado et al., 2016). Cette méthode présente

l'avantage de pouvoir définir des caractéristiques différentes pour chaque particule (e.g. vitesse de chute, masse) et de pouvoir suivre la provenance des sédiments et leur devenir. En revanche, ce type de modélisation demande en général de modéliser un grand nombre de particules pour représenter les concentrations de sédiments en suspension observées. Plus communément, la masse sédimentaire est suivie de façon eulérienne et la présence de particules en suspension est définie par une concentration dans chaque maille du modèle (Mengual, 2016).

Les modèles tridimensionnels sont rapidement venus compléter les modèles 2D, lesquels supposent quelques approximations sur la verticale (modèles 2DH) ou sur l'horizontale (modèle 2DV) (Ao et al., 2018). Les analyses se trouvent rapidement contraintes par la non prise en compte des effets 3D de la circulation barocline. La complexité, notamment liée au nombre de processus représentés, et les performances des modèles tridimensionnels ont considérablement augmenté au cours de ces dernières décennies. Ainsi, les modèles de transport ont progressivement été améliorés pour prendre en compte les distinctions entre comportements des sables et des vases. Des modèles spécifiques de floculation ont été développés et peuvent être couplés au modèle de transport (Verney et al., 2011), ainsi que des modèles de consolidation de la colonne sédimentaire (Grasso et al., 2018) ou des modèles de processus chimiques ou biologiques (Damveld et al., 2019).

1.6.3 Observations spatiales

L'ensemble des technologies permettant d'obtenir des visuels, orthophotographies, données altimétriques relatives à l'océan sont désignées par le terme océanographie spatiale. L'objectif ici n'est pas de décrire l'ensemble des données de manière exhaustive, mais la présentation des outils satellitaires utilisés dans le cadre de la thèse.

1.6.3.1 Télédétection de la couleur de l'eau

Les observations de la couleur de l'eau depuis l'espace sont possibles grâce aux satellites équipés de capteurs optiques. Ces capteurs passifs permettent de mesurer et quantifier les spectres de réflectances dans le domaine du visible et de l'infrarouge (pour les corrections atmosphériques). Les mesures sont donc dépendantes des propriétés optiques de l'océan superficiel.

En cas de temps clair, le signal capté par le satellite correspond à la lumière solaire transmise et réfléchi par la couche superficielle de l'océan, en tenant compte également de la diffusion atmosphérique. Cette diffusion représente cependant à elle seule en moyenne 80% du signal (Figure 1.6). Le signal corrigé de l'effet atmosphérique est représentatif à 90% d'une couche d'épaisseur égale à l'inverse du coefficient d'atténuation diffuse (Gordon, 1973). Selon les espèces dissoutes et en suspension, cette profondeur peut varier de quelques dizaines de centimètres en zone estuarienne, à plus d'une dizaine de mètres dans

les eaux claires océaniques.

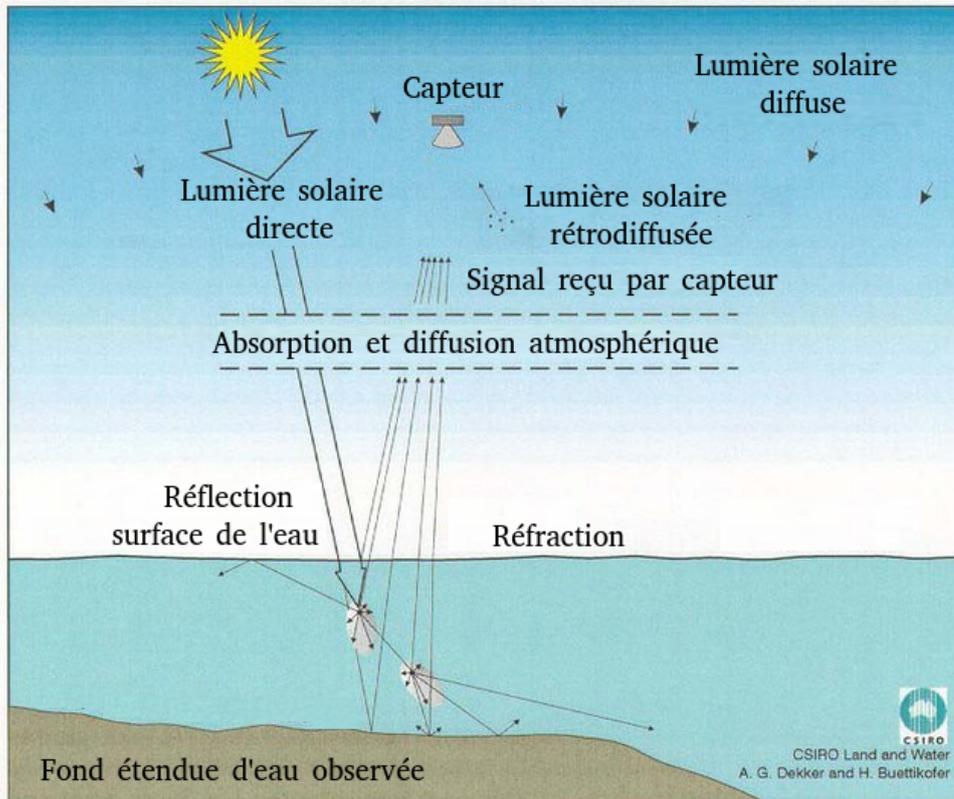


FIGURE 1.6 – Schéma du signal mesuré par le capteur satellitaire. L'épaisseur relative des flux montre l'importance de la part atmosphérique dans le signal mesuré (souvent plus de 80%).

Dans la littérature, deux types de propriétés optiques des océans sont définis : les IOP (Inherent Optical Properties) directement liés à la nature du milieu et les AOP (Apparent Optical Properties) qui peuvent dépendre aussi des conditions d'éclairement du milieu (Leathers et al., 1999).

La réflectance de l'eau à la longueur d'onde λ , notée $R_{rsw}(\lambda)$ est une AOP qui définit en quelques sortes la couleur de l'eau. Elle dépend des propriétés optiques de l'eau, avec ses matières en suspension dans les couches superficielles de l'océan. Sa notation est la suivante (Jerlov, 1977) :

$$R_{rsw}(\lambda) = \frac{\pi L_w(\lambda)}{E_d(\lambda)} \quad (1.1)$$

Avec :

- $L_w(\lambda)$: la radiance ascendante à partir de la surface océanique
- $E_d(\lambda)$: Irradiance solaire juste au-dessus de la surface océanique

La propagation de la lumière dans l'atmosphère est le signal prépondérant qui est mesuré par le capteur satellite (Gordon and Morel, 2012; Mobley, 1994). Afin de pouvoir

exploiter cette mesure et déterminer les composantes de l'eau il est nécessaire d'appliquer une correction supprimant au maximum le signal atmosphérique, la réflectance totale au sommet de l'atmosphère (TOA, pour Top Of Atmosphere), notée R_t est divisée en différentes composantes :

$$R_t = R_r(\lambda) + R_a(\lambda) + R_{ra}(\lambda) + t(\lambda)R_{wc}(\lambda) + t(\lambda)R_{rsw}(\lambda) \quad (1.2)$$

Avec

- R_r : diffusion de Rayleigh (contribution de la diffusion multiple par les molécules d'air)
- R_a : Diffusion multiple par les aérosols
- R_{ra} : Interaction Rayleigh/aérosols (Deschamps et al., 1983)
- R_{wc} : contribution de l'écume (*whitecaps*)

La difficulté majeure de restitution de R_{rsw} tient essentiellement au calcul des termes de diffusion des aérosols (R_a et R_{ra}). La diffusion de Rayleigh est connue avec précision en fonction de la pression atmosphérique. L'effet de l'écume est évalué d'après les vents de surface. Les modèles d'estimation de ces termes seront plus ou moins complexes, selon qu'ils prennent en compte une diffusion simple ou multiple, et selon la caractérisation des propriétés des aérosols (absorption/diffusion) (Gordon, 1973). Une fois les corrections atmosphériques appliquées, les algorithmes de la 'couleur de l'eau' permettent de calculer la concentration des composantes en suspension, à partir des réflectances R_{rsw} dans les différentes longueurs d'onde disponibles.

1.6.3.2 Restitution des composantes bio-optiques

Pour pouvoir analyser la concentration en MES mesurées depuis l'espace plusieurs composants bio-optiques sont extraits des observations satellitaires.

Trois grands groupes sont distingués en tant que constituant optique de l'océan :

- Le phytoplancton (Chl-a) : Le phytoplancton absorbe la lumière du soleil et utilise cette énergie pour produire des matières organiques (photosynthèse). La chlorophylle-a, présentes dans toutes les cellules du phytoplancton, provoquent deux pics dominants dans les spectres d'absorption, le pic primaire dans le bleu (440 nm) et le pic secondaire dans la partie rouge du spectre (675 nm). La présence d'autres pigments (selon les espèces et les taxons) entraîne l'élargissement du pic bleu et l'apparition de maxima d'absorption supplémentaires.
- Les Particules Non-Algales (NAP) : particules sédimentaires et/ou détritiques. Elles sont en concentrations importantes à l'approche du domaine côtier où elles sont principalement caractérisées par les apports lithogènes du continent. Elles incluent également la matière détritique, les bactéries hétérotrophes et les virus (observés principalement au large).

- Les Matières organiques dissoutes colorées (CDOM) : La quantification de la quantité de CDOM présente dans l'eau est basée sur l'absorption majoritairement dans le bleu.

Pour pouvoir déterminer ces éléments à partir des observations satellites, différents algorithmes de traitement sont mis en place. Trois méthodes sont communément admises, les modèles empiriques, semi-analytiques et ceux basés sur des réseaux de neurones. Les algorithmes empiriques reposent sur la validation in-situ avec des mesures de MES effectués sur site. Ces informations mesurées permettent de calibrer directement l'algorithme de télédétection.

Les algorithmes semi-analytiques utilisent une approximation inverse de la RTE (Radiative Transfer Equation) pour relier les Rrs aux a (coefficient d'absorption) et b_b (coefficient de rétrodiffusion). Ensuite les coefficients a et b_b sont calculé en se basant sur des lois empiriques définies en laboratoire. À partir de celles-ci il est possible de retrouver les concentrations en MES.

Les algorithmes basés sur les réseaux de neurones permettent d'effectuer directement l'inversion de la RTE sur les différentes bandes spectrales analysées. Ils présentent l'avantage de proposer des calculs directs de cette inversion et sont entraînés grâce à des mesures bio-optiques in situ. Ces modèles sont principalement conçus pour une utilisation globale et sont moins sensibles au bruit des mesures. Cependant, ils doivent absolument avoir à disposition un jeu de données d'apprentissage suffisant (principalement base de données de matchups) cela signifie qu'il est difficile d'identifier la source et la nature des erreurs durant le traitement (Gohin, 2011).

1.6.3.3 Bilan d'incertitudes et corrections

Au-delà des incertitudes liées au traitement algorithmique du signal de réflectance satellite, plusieurs incertitudes liées au passage de la lumière dans les différents milieux (atmosphère, océan, atmosphère) sont identifiées (voir Figure 1.6). Afin de pouvoir proposer des seuils de précision acceptables, plusieurs spécifications ont été établies. Dans un premier temps, deux calibrations des instruments sont effectuées. La calibration avant-lancement caractérise essentiellement les aspects instrumentaux, tandis que la caractérisation en orbite se limite généralement à la mesure du gain radiométrique et du rapport signal/bruit (Gohin, 2011). Les produits de couleur de l'océan sont extrêmement sensibles aux erreurs radiométriques, car la radiance r_e émise par l'eau ne représente qu'une petite partie du signal TOA (Top Of Atmosphere) (0-15%). Et donc, pour obtenir la précision visée (essentiellement pour les études climatiques) de 35% sur les paramètres bio-optiques satellites (Chla, NAP et CDOM), la radiance de l'eau à 443 nm (dans le cas de la Chl-a) doit être déterminée avec une précision d'environ 5% (Gordon, 1973). Cela nécessite une précision du signal TOA d'environ 0,5%. Le calcul de la loi de propagation des erreurs qui consiste à prendre la racine carrée de la somme des carrés de toutes les composantes

d'incertitude individuelles non corrélées exige que l'incertitude de chaque composante individuelle soit de préférence autour de 0,2%.

Les principaux obstacles lors de l'utilisation de données satellites sont liés aux données manquantes lors de l'acquisition. En effet, la qualité des informations issues des données transmises par les instruments dépend de la couverture nuageuse. Cet accès à la donnée implique, si l'on souhaite des données globales, de pouvoir interpoler ou étendre les données (Wang et al., 2013). Ce qui engendre un biais ou des erreurs.

1.7 Conclusion

Ce chapitre a permis de donner une définition de la turbidité. La turbidité est un paramètre qui dépend de plusieurs composants que l'on appelle MES. Ces MES pouvant être biogéniques ou minérales, la concentration en particules d'origine biologique correspond à la Chl-a tandis que dans le cas de particules terrigènes le terme utilisé est NAP, sur lequel se focalise ce travail. Ces particules sont soumises à plusieurs forçages environnementaux qui ont été décrits. Ces forçages, conditionnées par la bathymétrie et nature de fond, sont issus de processus physiques, mais aussi d'origine humaine. Les plus importants pour la suite de l'étude dans le nord du Golfe de Gascogne sont les courants de marée, les courants induits par le vent, et les vagues.

La mesure de la dynamique des sédiments en suspension est rendue complexe par la grande variété de formes et tailles de particules sédimentaires. Les mesures in-situ malgré leur apport direct d'information nécessite la mobilisations de ressources importantes sur site et donnent des informations très localisées. À l'inverse les modèles hydrosédimentaires sont basés sur des équations physiques pour calculer l'évolution spatio-temporelle des processus. Cependant les modèles usuels restent purement déterministes dans leur approche. Le dernier type de mesures évoquées est la mesure optique par satellite. Au-delà des corrections dues au processus optique de l'atmosphère et de l'océan, ces mesures restent dépendante de la couverture nuageuse (Figure 1.7). Les sédiments en suspension sont donc observables et mesurables, mais pour avoir une compréhension globale et une meilleure capacité d'analyse il est intéressant de proposer des produits améliorant ces mesures à l'échelle globale, en proposant des cartes de la surface complètes en temps et en espace. Une partie du travail de thèse s'attachera à donner des réponses sur ce point.

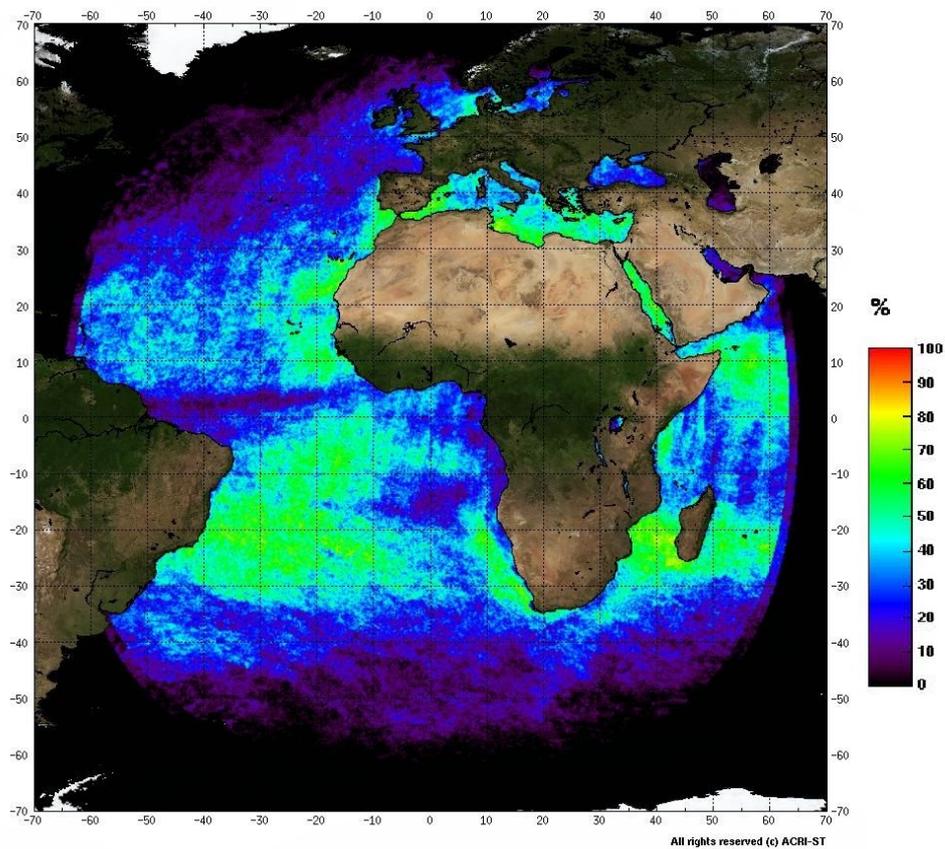


FIGURE 1.7 – Exemple de disponibilité mensuelle des données contraintes par la couverture nuageuse pour le mois de mars. Données réalistes de couverture nuageuse d’après Météosat Seconde Génération pour l’année 2007, appliquée à une acquisition par les deux satellites défilants Sentinel-3/OLCI (Antoine, 2016).

DONNÉES DANS LE GOLFE DE GASCOGNE

2.1 Zone d'étude : Le Golfe de Gascogne

2.1.1 Introduction

Le Golfe de Gascogne (GdG) est un cas d'étude complexe en raison de sa configuration (large domaine côtier, multiples estuaires, nature de fond complexe) et de la diversité des forçages y intervenant (vagues, vent, marée, apport fluviaux, activités de chalutage). Il s'étend du Cap Finistère en Espagne à la pointe bretonne. Il se caractérise morphologiquement par un plateau continental de largeur variable orienté NW-SE parallèle au trait de côte. Ce plateau est bordé par un talus descendant vers la plaine abyssale.

Le GdG se distingue par une importante diversité des processus physiques qui génèrent les courants. Ceux-ci résultent des influences combinées de la marée, du vent, des différences de densité de l'eau de mer et de la circulation à grande échelle. Chaque processus génère des courants de nature différente, également fortement contrainte par la bathymétrie. On distingue ainsi les courants sur le plateau, sur le talus continental et sur la plaine abyssale.

La circulation générale des masses d'eau dans le Golfe de Gascogne, i.e. de la plaine abyssale au plateau, a largement été étudiée à partir de différents types d'observations : par bouées dérivantes (Cocquempot et al., 2019; Huthnance et al., 2002); par courantomètres (Batifoulier et al., 2012; Kersalé et al., 2013) ou grâce au développement de modèles numériques (Lazure and Dumas, 2008; Pingree and New, 1995). Plusieurs synthèses de ces circulations sont proposées dans la littérature (Koutsikopoulos and Le Cann, 1996; Mengual et al., 2019). L'intérêt du GdG en tant que zone d'étude privilégiée pour les dynamiques sédimentaires se traduit par plusieurs axes de recherches portant sur les apports fluviaux (Petus et al., 2010, 2014; Prego et al., 2008), les flux et taux de sédimentation (Vrel et al., 2013) ainsi que les dynamiques des sédiments dans les canyons sous-marins (Durrieu De Madron et al., 2005).

2.1.1.1 Bathymétrie et géomorphologie

Le Golfe de Gascogne se situe sur le bord Est de l'Océan Atlantique Nord et borde deux pays européens : la France et l'Espagne. L'organisation hydrographique internationale définit la limite Nord du Golfe de Gascogne à la Pointe de Penmarc'h (47,80°N ; 4,37°O ; Sud de la Bretagne) et la limite Sud et Ouest du Golfe de Gascogne au Cap Ortegat (43,77°N ; 7,87°O) (Figure 2.1).

Le Golfe de Gascogne est composé de trois principales structures topographiques, les plaines abyssales à l'Ouest situées à plus de 4000 m de profondeur, le plateau continental qui s'étend des côtes françaises et espagnoles jusqu'à 200 m de profondeur et le talus continental qui les sépare entre 200 et 4000 m de profondeur. Le plateau continental du Golfe de Gascogne se décompose du Nord au Sud en trois structures géographiques distinctes : le plateau Armoricaïn, le plateau Aquitain et le plateau ibérique. Ces trois plateaux sont délimités au large par l'isobathe 200 m. Le plateau Armoricaïn est orienté du Nord-Ouest au Sud-Est et s'étend sur une longueur de plus de 300 km pour plus de 150 km de large. Il est délimité au Nord par la mer d'Iroise et l'entrée de la Manche (48,64°N ; -4,56°O) et au Sud par le plateau de Rochebonne (46,22°N ; -2,46°O). Le plateau Aquitain est moins large (50 – 150 km), il est orienté du Nord au Sud. Il est délimité au Nord par le plateau de Rochebonne (46,22°N ; -2,46°O) et au sud par le Canyon du Capbreton (43,67°N ; -1,62°O). Le plateau ibérique est le plus étroit (30 – 40 km), il est orienté de l'Est à l'Ouest de façon quasi horizontale. Il est délimité à l'Est par le Canyon du Capbreton (43,67°N ; -1,62°O) et à l'Ouest par le Cap Ortegat (43,77°N ; -7,87°O).

2.1.1.2 Grande Vasière

La "Grande-Vasière" (ci-après GV) s'étend de Penmarc'h au nord jusqu'au haut-fond de Rochebonne au sud sur le plateau continental atlantique français sur une surface totale d'environ 17 500 km². On pense que la présence de vase dans la zone GV résulte de dépôts holocènes encore alimentés par un apport contemporain de sédiments fins (Dubrulle et al., 2007). Les rivières qui alimentent le Golfe de Gascogne fournissent environ 2,5E6 t/an de sédiments fins au plateau (Mengual et al., 2019), avec des contributions principales des estuaires de la Gironde et de la Loire de 1,5E6 t/an et 0,5E6 t/an respectivement. Mengual et al. (2019) ont décrit le GV comme une "ceinture de vase" représentant 75% de la surface couverte par des sédiments vaseux sur le plateau atlantique français. Cependant, Dubrulle et al. (2007) l'ont décrit comme un 'patch' de sables mal triés avec du matériel sédimentaire fin piégé. Cette description est soutenue par des observations montrant que la teneur en sédiments fins ne dépasse pas 30%, sauf près des deux extrémités (près de Penmarc'h et du haut-fond de Rochebonne) identifiées comme des déposeurs préférentiels de sédiments fins.

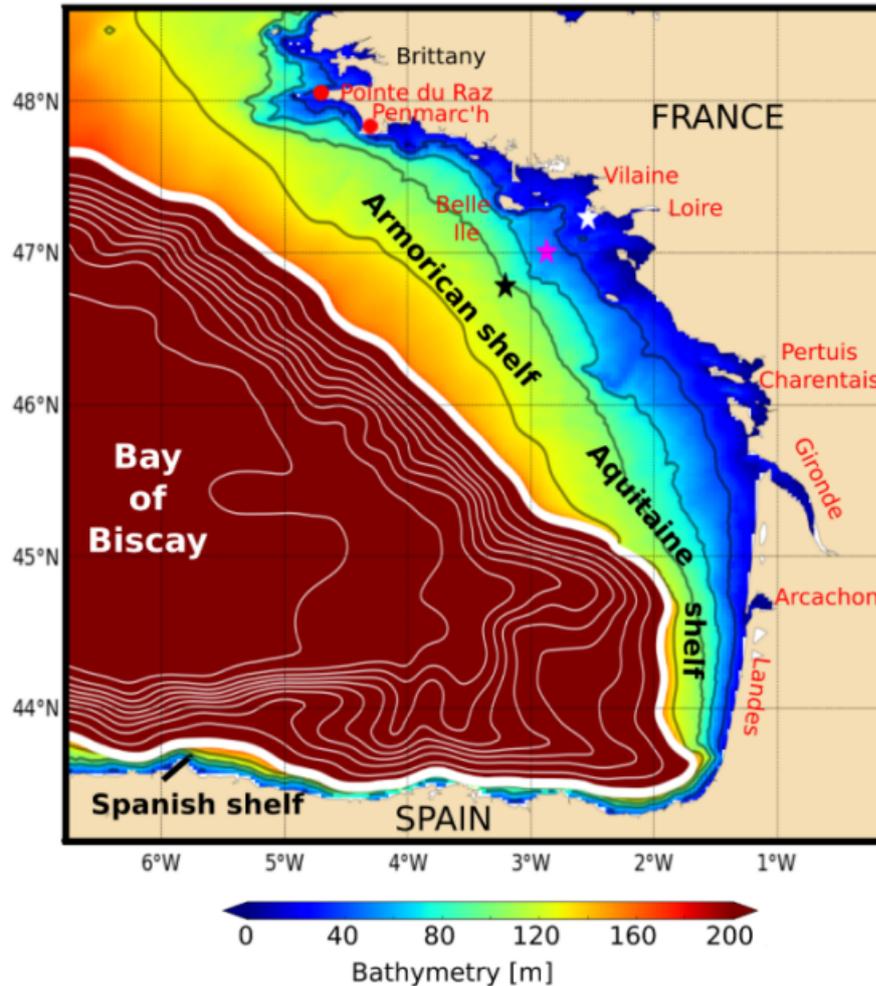


FIGURE 2.1 – Bathymetrie du Golfe de Gascogne d’après les paramètres du Modèle MARS-MUSTANG Mengual (2016). La ligne blanche épaisse (correspondant à l’isobathe de 180 m) délimite approximativement le bord du plateau.

2.1.2 Processus physiques et dynamique du GdG

Cette section propose de décomposer les principaux processus physiques et les dynamiques associées qui caractérisent le GdG. Les marées et les courants associés qui sont à l’origine des phénomènes observables à la côte et au fond seront décrits dans un premier temps. Les processus de courant et vague influents également au fond pour les courants et vagues en surface seront ensuite abordés. Lié aux vagues le vent fera également l’objet d’un développement. Enfin, une quantification des apports continentaux sera proposée pour conclure sur les différents phénomènes importants du GdG.

2.1.2.1 Marée

La marée est constituée d'une somme de différentes composantes harmoniques associées pour certaines aux mouvements des deux astres considérés (lune et soleil) et pour d'autres à des interactions non-linéaires des composantes de marée entre elles. La composante de marée qui prédomine dans le golfe de Gascogne est l'onde de marée semi-diurne M2 (Lune semi-diurne) (période de 12,42 h) et S2 (solaire demi-diurne) responsable de l'élévation de la surface d'environ 1,6 m à la côte (Le Cann, 1990). Les autres composantes de marée ont une influence relative moindre, néanmoins la prise en compte de l'ensemble de ces composantes est essentielle à la reconstitution d'un signal précis de marée dans le golfe de Gascogne. L'onde de marée est amplifiée sur le plateau continental et se propage du large vers la côte. Les courants générés par la composante de marée M2 sont les plus forts là où le plateau est le plus large. Ils augmentent donc du Sud du golfe de Gascogne vers le Nord pour atteindre leur maximum à l'entrée de la Manche (50 cm/s). Sur le plateau Aquitain, les courants de marée sont d'environ 3 cm/s, pour 15 cm/s sur le plateau Armoricaïen, avec des amplifications locales importantes de l'ordre de 1 m/s, au niveau de l'embouchure de la Gironde par exemple. Sur un cycle complet de marée, le courant résiduel de marée est très faible sur le plateau (< 1 cm/s) à l'exception près des côtes et des changements abrupts de bathymétrie où le courant résiduel peut être d'un ordre de grandeur supérieur (10 cm/s) (Figure 2.2).

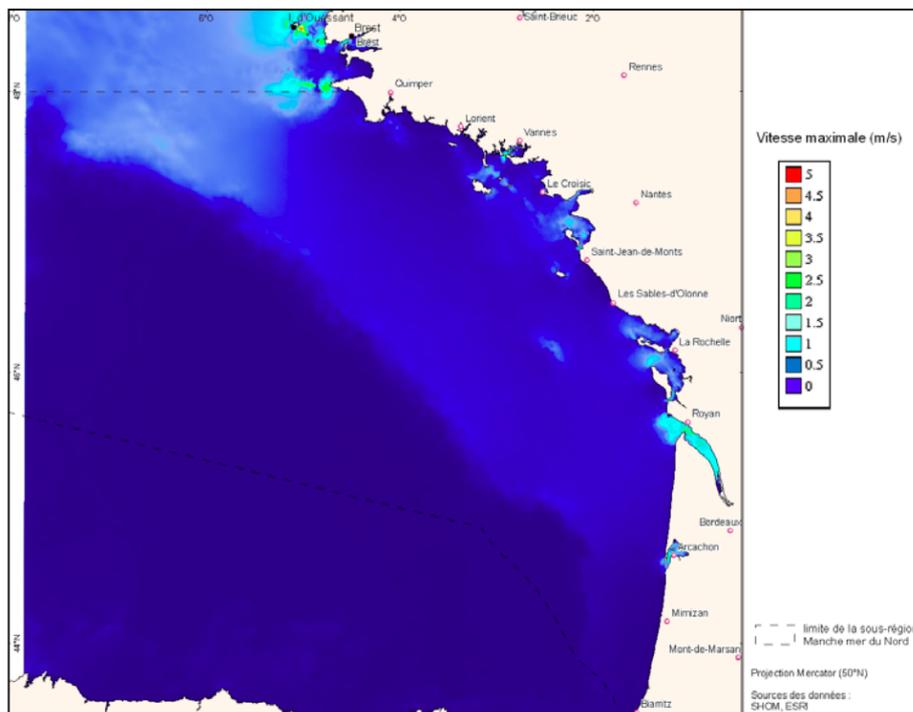


FIGURE 2.2 – Projection 2D des vitesses des courants de marée calculées sur 10 ans (2021-2020). Données issue de la base de données SHOM.

La marée contribue également au mélange de la couche de surface au niveau du talus continental à travers la génération d'ondes internes. Les ondes internes sont générées au niveau du talus continental. Les variations abruptes de la topographie créent une vitesse verticale importante lors du flux et du reflux des courants de marée barotropes qui induisent une oscillation des isopycnes (surfaces de mêmes densités) au rythme de la marée semi-diurne. Ces ondes internes se propagent de part et d'autre du talus dans la thermocline. L'oscillation ainsi générée le long de la thermocline estivale contribue au mélange diapycnal (entre les isopycnes) dans la couche de surface (Pairaud, 2005). Le long du talus continental, ce mélange induit en surface, sur une étendue d'environ 30 km de large, des eaux dont la température de surface est de 1 à 2°C plus froide que les eaux situées aux alentours. Cette langue d'eau froide est visible de la fin du printemps à l'automne (Pingree and New, 1995).

En résumé, le courant marée étant très faible, le transport des masses d'eau dépend principalement du vent et des gradients de densité (Lazure and Dumas, 2008). Néanmoins la marée agit de façon indirecte sur le transport des masses d'eau en induisant de forts gradients de densité près des côtes et du talus continental.

2.1.2.2 Vents

La circulation atmosphérique dans l'Atlantique Nord et l'Europe de l'Ouest est gouvernée par deux principaux centres d'activités atmosphériques : une zone de haute pression atmosphérique centrée en moyenne près des Açores (anticyclone des Açores) et une zone de basse pression centrée en moyenne près de l'Islande (dépression islandaise). La circulation géostrophique qui résulte de ce gradient méridien de pression entraîne une prédominance des vents d'ouest sur le Golfe de Gascogne. Cette circulation zonale Ouest-Est varie en intensité et en direction selon les saisons. Les directions et vitesses de vents moyennées à l'échelle du Golfe de Gascogne mettent en évidence deux régimes de vents saisonniers. Durant le printemps et l'été la direction du vent est majoritairement ouest-nord-ouest avec une faible occurrence de vitesses de vents supérieures à 10 m/s. Durant l'automne et l'hiver le vent s'accélère et bascule en direction sud-sud-ouest (Figure 2.3). Ces variations de directions saisonnières s'expliquent en partie par l'intensification de la dépression islandaise en hiver et de l'anticyclone des Açores en été, qui entraîne une différence d'inflexion dans la direction moyenne des vents. Sur la façade atlantique, quelques phénomènes d'upwelling sont notables. Le phénomène d'upwelling se produit lorsque le vent pousse l'eau de surface des océans, laissant ainsi un vide où peuvent remonter les eaux de fond. Les écarts de températures ainsi créés sont à l'origine de courants résultant des différences de gradients de température, en plus de remobiliser des nutriments depuis le fond.

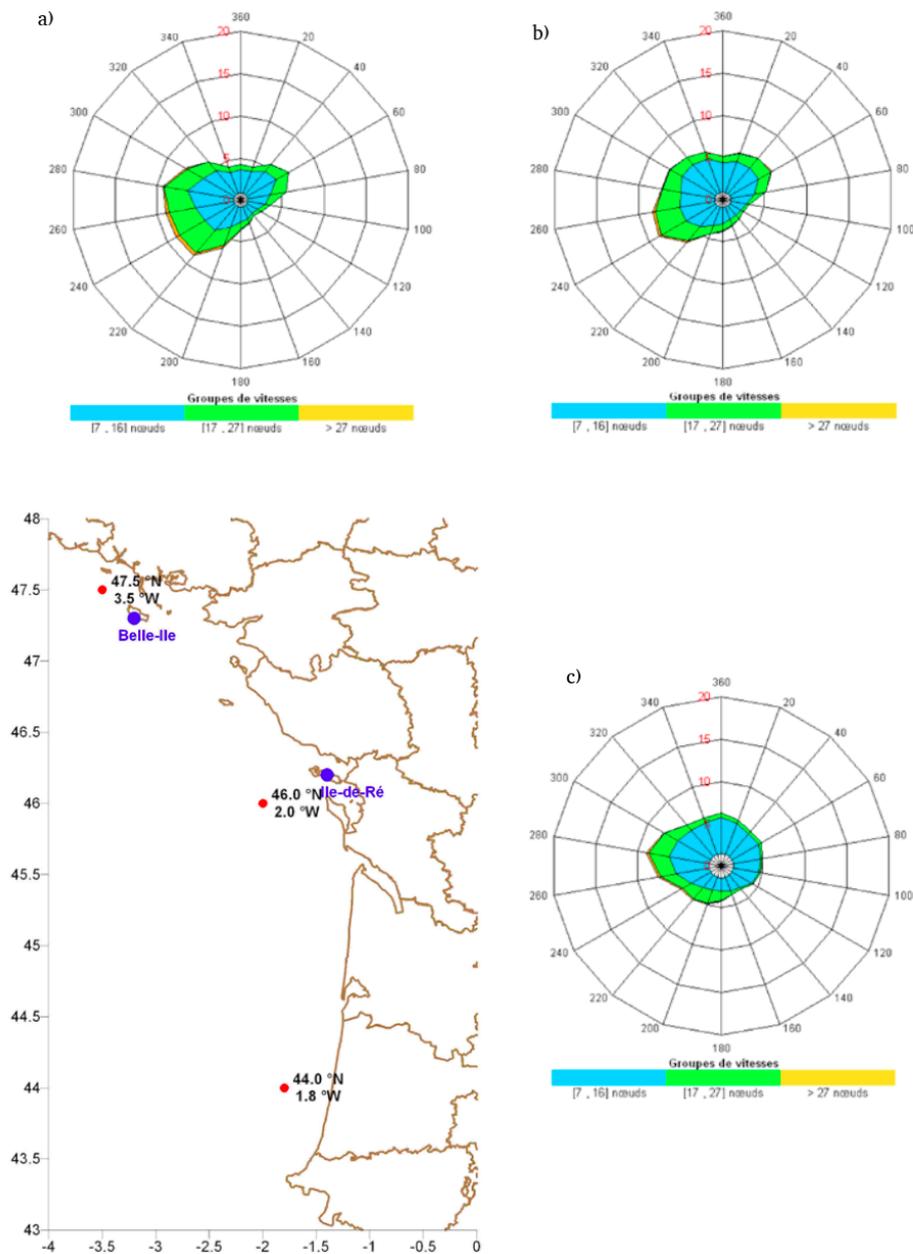


FIGURE 2.3 – Roses de vent annuelles pour 3 points situés au nord (a), au centre (b) et au sud (c) dans le golfe de Gascogne (de gauche à droite). (Source : Météo-France, 2007).

2.1.2.3 Circulation générale

La figure 2.4 reprend l'ensemble des circulations de surface caractéristiques du Golfe de Gascogne. Au niveau de la plaine abyssale, celle-ci est située entre deux branches de la circulation de l'Atlantique Nord : la dérive Nord Atlantique au Nord et le courant des Açores au Sud. Une branche retour de la dérive Nord Atlantique entre dans la plaine

abyssale du golfe de Gascogne est présente en surface (0 - 75 m) traduite par une circulation anticyclonique associée à de faibles vitesses de surface (1 - 2 cm/s) (Oms, 2019). Le courant principal le long du talus continental est appelé l'Iberian Poleward Current (IPC). L'IPC est formé au large des côtes du Portugal, il remonte vers le Nord en suivant le talus (Le Cann, 1990). Contraint par la bathymétrie il repart vers le bloc ibérique.

Sur le plateau continental, la circulation sur le plateau est principalement influencée par les vents et les gradients de densité induits par les flux de chaleur et d'eau douce (Oms, 2019). En hiver, la circulation résiduelle sur le plateau est dirigée vers le Nord (2 - 5 cm/s), elle diminue d'intensité et s'inverse vers le Sud en été (2 cm/s).

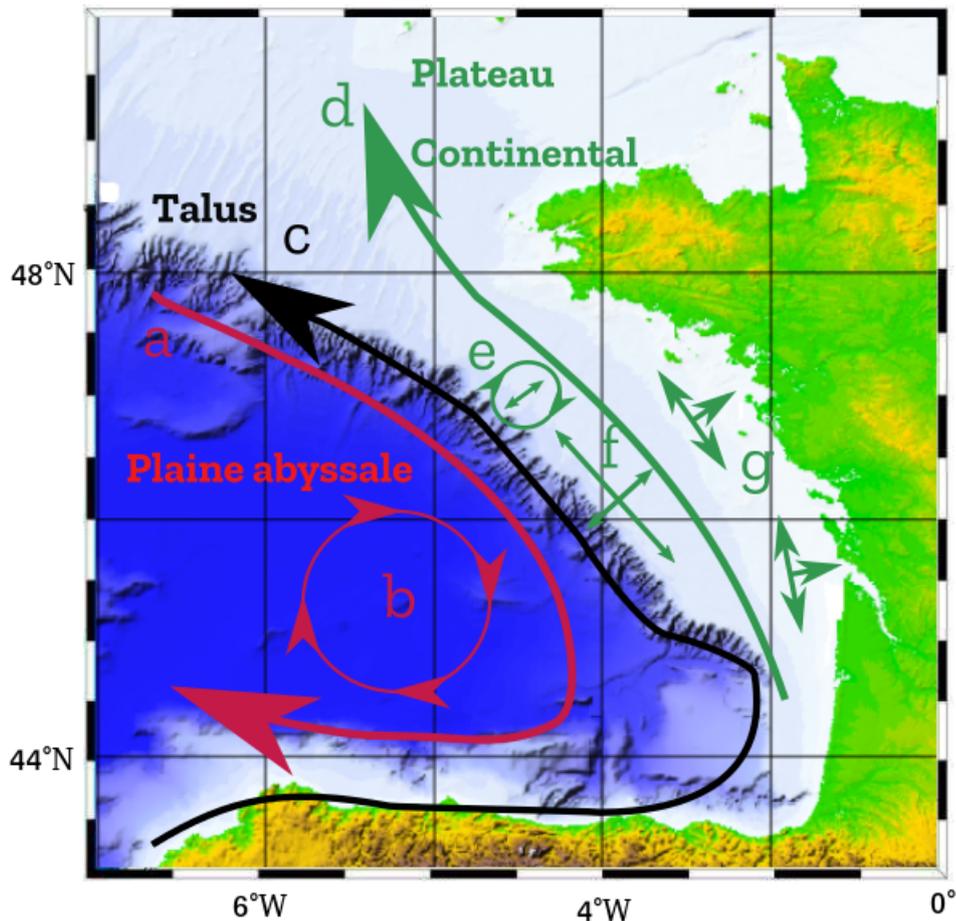


FIGURE 2.4 – Représentation schématique de la circulation de surface dans le Golfe de Gascogne modifiée d'après Oms (2019). a. Circulation générale de l'Atlantique Nord; b. Tourbillons anticycloniques; c. Courant de pente; d. Courant résiduel de surface; e. Courants de marée; f. Courants induits par les vents; g. Courants de densité induits par les apports d'eau douce.

2.1.2.4 Vagues

Dans le GDG les hauteurs significatives (vagues) les plus élevées se rencontrent l'hiver avec le passage des perturbations. Ces hauteurs augmentent vers le large pour atteindre des valeurs égales ou supérieures à 3 m. L'été, près des côtes, les hauteurs significatives restent le plus souvent inférieures à 1 m. Au large, elles restent généralement inférieures à 2 m. La houle d'ouest domine sur le nord du domaine, puis la direction ouest nord-ouest s'impose en hiver comme en été en descendant vers le sud. L'hiver, une houle de hauteur moyenne supérieure à 2 m est fréquente au large et sur les côtes de la pointe de Bretagne. L'été, la hauteur moyenne près des côtes ne dépasse pas 1 m.

2.1.2.5 Apports continentaux côtiers

Les apports d'eau douce dans le Golfe de Gascogne induisent de fortes stratifications halines sur le plateau selon la propagation des panaches fluviaux à la surface. La stratification haline étant dépendante des débits, elle est en général minimale au début de l'automne, et maximale au début du printemps (Lazure and Dumas, 2008; Puillat et al., 2004). Les apports d'eau douce peuvent induire des gradients de densité importants qui génèrent d'intenses courants baroclines s'écoulant vers le Nord dans la couche de surface (Chapman and Lentz, 1993). La vitesse modélisée de ce courant barocline peut atteindre 20 cm.s⁻¹ (Lazure and Jegou, 1998).

En l'absence de forçage par le vent, les panaches fluviaux forment une cellule tourbillonnaire anticyclonique à l'embouchure de l'estuaire prolongée par un étroit courant côtier à droite de l'estuaire dans le sens de l'écoulement (Garvine, 1987). L'action du vent sur le panache peut renforcer ou inverser cette circulation type selon sa direction (Chao, 1988).

En automne et en hiver, on observe une advection préférentielle des panaches vers le nord et restreinte à la côte alors qu'au printemps et en été, l'orientation des panaches est inversée. Pour expliquer ces variations saisonnières Lazure and Jegou (1998) ont modélisé l'évolution des panaches de la Loire et de la Gironde sous l'effet combiné de la marée, du vent et des forçages thermiques et halins. En hiver, dans le Golfe de Gascogne, les vents de sud-sud-ouest entraînent des downwellings à la côte qui par compensation géostrophique vont intensifier l'advection des panaches vers le Nord, le long des côtes, jusqu'en Mer d'Iroise. En Été, les vents de nord-nord-ouest entraînent les upwellings à la côte, qui vont inverser l'advection des panaches vers le large et vers le sud. De plus, la forte stratification de la colonne d'eau en été permet un découplage plus important de la couche de surface moins dense que celle du fond. L'advection du panache vers le large est alors intensifiée et des dessalures sont visibles jusqu'au talus (Puillat et al., 2004).

2.2 Produits disponibles

Cette section présente l'ensemble des produits qui ont été utilisés. Sont décrits ici les configurations des modèles MARS/MUSTANG et WaveWatch III utilisés ; des informations sur l'intensité de la marée ainsi que la description des produits satellitaires MODIS exploités dans cette étude.

2.2.1 Bathymétrie

Le modèle de bathymétrie utilisé dans cette thèse provient de la base de données Sextant de l'IFREMER¹. Le jeu de données est produit à partir de semis de points du SHOM, de l'Ifremer et du levé de quelques isobathes pour compléter. L'ensemble est compilé, avec interpolation géostatistique, pour obtenir l'ensemble des points de la grille. Le produit disponible est à la résolution spatiale 1000 m.

2.2.2 Coefficients de marée

L'information d'intensité moyenne de marée, utilisée en tant que forçage dans nos expériences, est le coefficient de marée. Basé sur l'amplitude de la marée à Brest, le coefficient de marée donne une bonne indication de l'intensité de la marée en Manche. Ce paramètre permet d'identifier facilement le cycle morte-eau/vive-eau de la marée et varie entre 20 (marée de morte-eau) et 120 (marée de vive-eau). En effet, il a été choisi de privilégier, pour simplifier, les coefficients de marée aux courants barotropes. L'hypothèse retenue est celle selon laquelle l'intensité moyenne de ces courants barotropes est corrélée avec le coefficient de marée. Les autres courants (ondes de tempêtes) sont considérés comme contenus indirectement dans le modèle de vagues (voir 2.2.4.1). Il aurait été plus précis d'exploiter, par exemple, un modèle de courants barotropes forcés par les pressions et vents météo, en plus du potentiel astronomique des marées. Le produit de coefficient de marée utilisé est celui du SHOM². Il contient les informations des ondes semi-diurnes et calculé selon les marnages semi-diurnes, selon la formule suivante :

$$C = \frac{H_h - H_b}{U} \times 100 \quad (2.1)$$

Avec :

- H_h la hauteur d'eau de la pleine mer
- H_b la hauteur d'eau de la basse mer suivant la marée haute
- U valeur moyenne du marnage propre à la localité (à Brest, 6,10 m)

1. Disponible en ligne : <https://sextant.ifremer.fr/record/7e4f3c00-4b00-11e0-8fd0-005056987263/>
2. disponible en ligne : <https://data.shom.fr/donnees/refmar/418>

2.2.3 Observations spatiales

Le jeu de données d'observation satellites utilisé dans le cadre de cette thèse est issu du capteur MODIS (AQUA et TERRA). Le choix de ce jeu de données a été réalisé pour des raisons de résolution spatiale (1000 m \times 1000 m) et en raison de sa répartition temporelle importante sur près d'une vingtaine d'années (2002-2020). Les corrections atmosphériques standards sont préalablement appliquées selon Gohin (2011). Les images utilisées sont de niveau L2 (images géo-référencées, avec corrections atmosphériques standard NASA appliquées) et les valeurs de concentration sont obtenues en utilisant un algorithme intitulé OC5-Ifremer (qui est une variante de l'algorithme standard OC4 : Ocean Colour 4 Channels) développé par Francis Gohin (Gohin et al., 2005). L'ensemble des données est disponible sur les serveurs de l'IFREMER : <ftp.ifremer.fr/ifremer/cersat/products/gridded/ocean-color/>

2.2.3.1 Méthode pour obtenir la chlorophylle-a à partir des réflectances

L'estimation de la chlorophylle-a (Chla) via l'algorithme OC5-Ifremer est obtenue à partir d'une méthode empirique (Gohin et al., 2005) basée sur l'application d'une table de correspondance aux réflectances de télédétection (Rrs). La méthode est une variante de l'algorithme OC4/SeaWiFS de la NASA (O'Reilly and Maritorena, 2000), ou OC3M-547 pour MODIS, mais donne des résultats bien plus réalistes dans les eaux côtières où la diffusion par les matières en suspension minérales et l'absorption par les substances organiques dissoutes colorées (CDOM) est à l'origine de fortes erreurs dans l'application des algorithmes standards. Le principe d'OC4 est de relier la concentration en chlorophylle au rapport de réflectance dans le domaine Bleu sur Vert du visible pour tenir compte du fait que le pigment chlorophyllien absorbe dans le bleu (pic d'absorption à 443 nm). La relation est donc inverse entre les réflectances Bleu/Vert et la concentration en chlorophylle. Alors qu'OC4 (Ocean Colour 4 Channels) utilise 4 canaux allant de 442 nm (bleu) à 555 nm (vert) et détermine la Chla à partir du maximum des trois rapports $Rrs(\text{bleu})/Rrs(\text{vert})$ calculées à partir de trois canaux dans le bleu, de 442 nm à 510 nm, l'algorithme OC5-Ifremer tient compte aussi des niveaux absolus de réflectance dans la plus petite longueur d'onde disponible (412 nm) et dans le Vert (555 nm). La concentration en chlorophylle-a est donc définie, pixel par pixel, à partir du triplet ($Rrs(412)$, $Rrs(\text{Vert})$, Maximum OC4 ($Rrs(\text{Bleu})/Rrs(\text{Vert})$)). $Rrs(412)$ est sensible à l'absorption par le CDOM et à l'erreur de la correction atmosphérique de la donnée de départ (sommet de l'atmosphère), particulièrement marquée aux courtes longueurs d'onde où le signal marin est faible. $Rrs(\text{Vert})$ est pris en compte pour évaluer l'effet de diffusion par les particules minérales en suspension si elles sont plus nombreuses sur le plateau continental après les tempêtes ou par fort coefficient de marée.

2.2.3.2 Méthode pour obtenir les Particules Non-Algales (NAP) à partir des réflectances

Dans l'algorithme mis en place par F. Gohin (Gohin et al., 2005), les NAP sont définies comme la différence entre les MES totales observée et la mesure de la Chla convertie en concentration massique particulière. Cette information provient de l'équation (16) proposée par Gohin et al. (2005), issus de la comparaison de données in-situ et observations satellitaires dans La Manche. L'équation permettant de déterminer ces NAP est une inversion d'une équation simplifiée du transfert radiatif. Dans celle-ci, la concentration en Chla est supposée connue. Le CDOM étant considéré comme lié de manière linéaire aux valeurs de Chla et NAP (Petus et al., 2010) il est négligé dans l'algorithme. Les réflectances utilisées par l'algorithme sont dans la gamme 550 à 670 nm. Le type de bande sélectionnée délimite les seuils de détection des concentrations. Ainsi la réflectance à 550 nm est utilisée pour les concentrations allant jusqu'à 4 mg/l, 670 nm étant réservé pour les concentrations supérieures. Dans cette méthode, nous considérons que l'absorption par les substances jaunes peut être négligée aux longueurs d'onde supérieures à 550 nm.

Le premier système d'équations de l'algorithme exprime les coefficients d'absorption a et de rétrodiffusion b en fonction de la *Chla* et des *NAP* :

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + a_\sigma(\lambda) + a_{NAP}(\lambda) = a_w(\lambda) + a_\sigma^*(\lambda) \times Chla + a_{NAP}^*(\lambda) \times NAP \quad (2.2)$$

$$b_b(\lambda) = b_{bw}(\lambda) + b_{b\sigma}(\lambda) + b_{bNAP}(\lambda) = b_{bw}(\lambda) + b_{b\sigma}^*(\lambda) \times Chla + b_{bNAP}^*(\lambda) \times NAP \quad (2.3)$$

Avec :

- a_w et b_w coefficients d'absorption et de rétrodiffusion de l'eau pure
- a_σ et $b_{b\sigma}$ les coefficients d'absorption et de rétrodiffusion du phytoplancton
- a_{NAP} et b_{bNAP} les coefficients d'absorption et de rétrodiffusion des NAP
- a_σ^* et a_{NAP}^* les coefficients d'absorption spécifiques du phytoplancton et des NAP (disponibles dans la littérature)
- $b_{b\sigma}^*$ et b_{bNAP}^* les coefficients de rétrodiffusion spécifiques du phytoplancton et des NAP (disponibles dans la littérature)
- λ la longueur d'onde optique

Dans un deuxième temps, une relation est définie entre la réflectance de télédétection $Rrs(550)$ et les coefficients d'absorption a et de rétrodiffusion b_b :

$$\frac{b_b}{a + b_b} = \alpha + \beta \times Rrs(550) \quad (2.4)$$

Les coefficients α et β sont obtenus par minimisation sur un jeu de données in situ de concentrations en chlorophylle-a (Chla) et en particules non-algales NAP, celles-ci permettant de calculer les valeurs de a et b_b (EQ :2.4)

A partir de ses équations et en considérant que la concentration en Chla est connue

selon les *Look Up Table* définies en amont et suivant l'hypothèse selon laquelle les coefficients d'absorption et de rétrodiffusion des NAP sont proportionnels à leur concentration ; les équations sont combinées pour déterminer la dernière inconnue qui est *NAP* la concentration en NAP.

Comme évoqué au début de la section, l'utilisation de la bande 550 nm n'est utilisée que pour déterminer des concentrations en dessous de 4 mg/l. Dans le cas où les concentrations arriveraient à saturation avec le canal 550 nm soit un milieu avec une eau plus turbide, c'est celui à 670 nm qui sera utilisé (Gohin, 2011).

Des corrélations ont été effectuées afin de mettre en place la "Look Up Table" des concentrations proposées par l'algorithme de traitement. Celles-ci se sont principalement déroulées dans le GdG, durant différentes campagnes en mer et sont résumées dans la figure suivante 2.5.

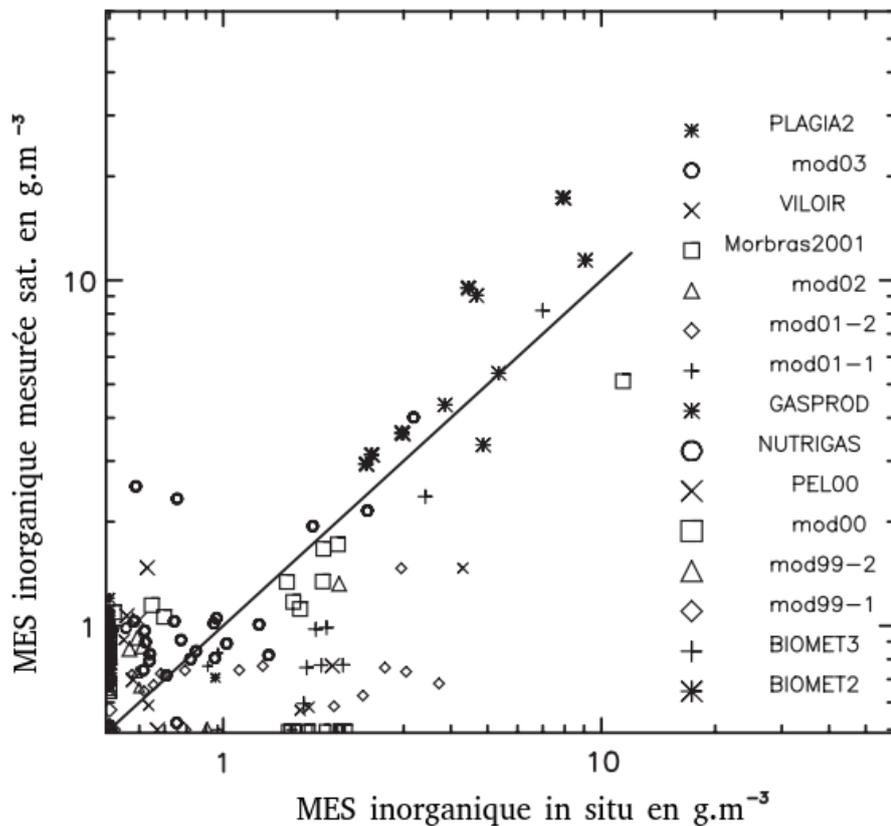


FIGURE 2.5 – Validation de la "Look Up Table" de Gohin (2011) de l'algorithme de traitement des réflectances pour la concentration en SPM. Les noms des points correspondent à plusieurs campagnes de mesures in situ effectuées en GdG

2.2.3.3 Validation de l'algorithme et caractérisation des erreurs

D'autres validations ont été effectuées sur la mesure de la turbidité. Une formule de la turbidité liée à la Chla après ajustement avec les données in situ et aux NAP est définie

par l'équation suivante (Gohin, 2011) :

$$Tur_{NTU} = \alpha(NAP + 0.234 \times Chla^{0.57}) \quad (2.5)$$

Avec α issue de la regression des données in situ de turbidité (Figure 2.5). La valeur en NTU obtenue est alors convertie en FNU selon la relation :

$$Tur_{FNU} = 1.267 \times Tur_{NTU} \quad (2.6)$$

Ces valeurs ont été comparées avec des valeurs de turbidité enregistrée sur différentes stations de mesures (REPHY) et sont compilées dans la figure 2.6.

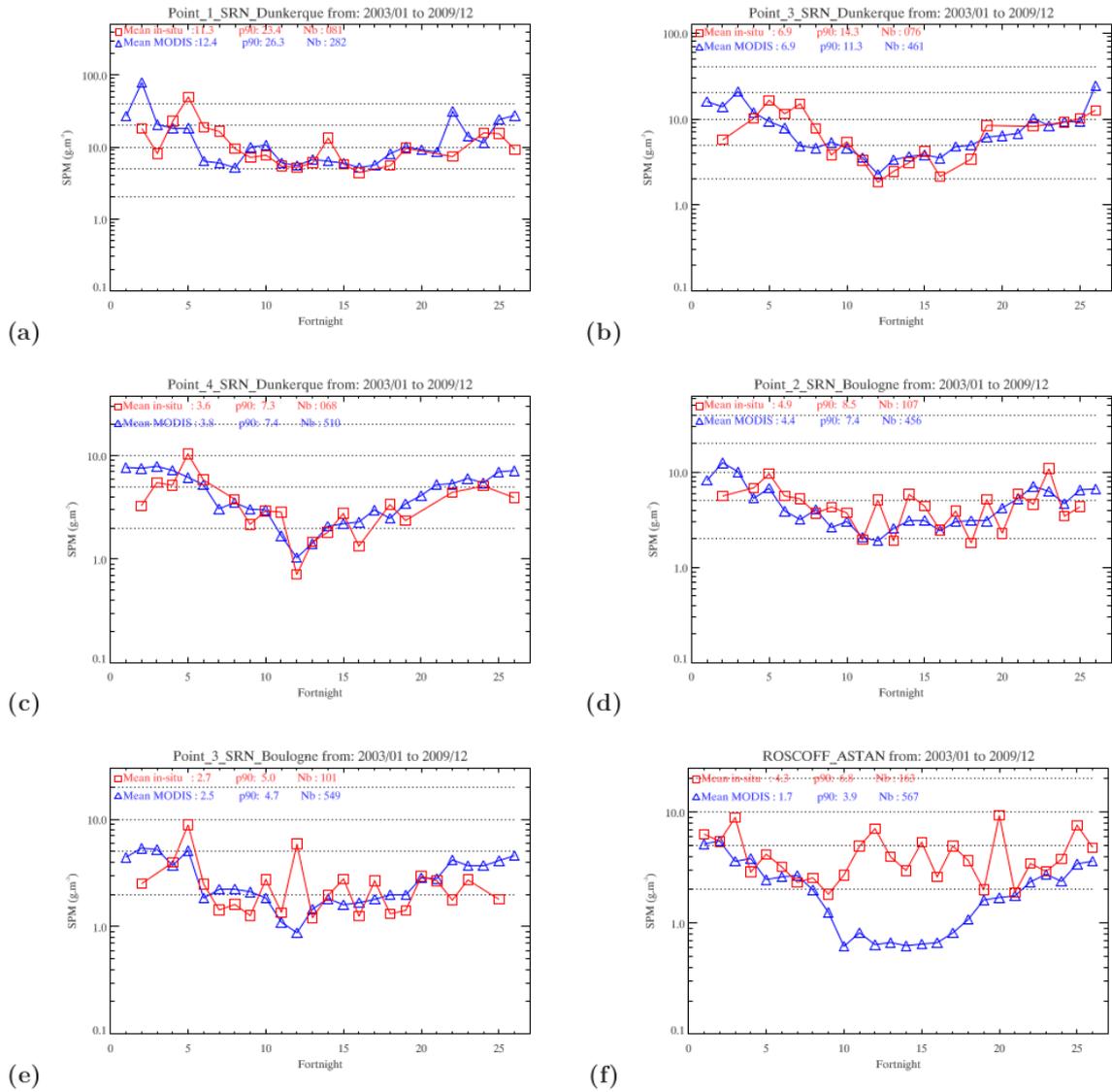


FIGURE 2.6 – Cycles annuels de la MES non-algale aux 6 stations de la Manche où elle est mesurée (Gohin, 2011) : comparaisons entre les données in situ et satellite MODIS. L'échelle de temps est exprimée en quinzaine de jours

du code WaveWatch III (WW3) Tolman (2009) et utilise la paramétrisation des termes sources décrite par Ardhuin et al. (2009a) et validée par Ardhuin et al. (2009b) à l'aide de données satellites. Une première grille couvre l'Atlantique Nord, de 80°O à 0°O et de 0°N à 70°N avec une résolution de 1°. Une seconde grille est emboîtée dans le Golfe de Gascogne avec une résolution de 0.2°. Le modèle est forcé par les vents réanalysés du *National Center for Environmental Predictions* américain (NCEP) disponible toutes les 6 h pour la période 1953-2009 (Kalnay et al., 1996). Une simulation de 20 ans a été réalisée, afin d'obtenir des séries temporelles de Hs (Hauteurs significatives) espacées de 12 h et pour tous les nœuds de la seconde grille. Les simulations ont été réalisées pour un niveau moyen de la mer et les interactions avec les courants n'ont pas été prises en compte. Cette simulation est issue des résultats des simulations WW3 de Boudière et al. (2013). Dans le reste du travail ces valeurs de Hs seront utilisés comme données de forçage dans nos simulations d'apprentissage automatique, et désignées simplement sous le terme "Vagues".

2.2.4.2 Modèle hydrodynamique MARS3D

Le modèle MARS3D vise à décrire l'évolution des courants, de la température et de la salinité sur l'ensemble du GdG. Le modèle hydrodynamique MARS3D (3D hydrodynamical Model for Applications at Regional Scale) est un modèle à surface libre aux différences finies suivant une grille Arakawa-C qui résout les équations de Navier-Stokes (Kleptsova et al., 2009) sous l'approximation de Boussinesq (Zeytounian, 2003) et l'hypothèse d'hydrostaticité. Le modèle résout séparément, mais avec un même pas de temps, un mode barotrope (2D), qui fournit l'élévation de la surface libre et les courants barotropes, et un mode qui calcule les courants baroclines (3D). La résolution verticale est répartie sur 10 niveaux σ équidistants et qui épouse les reliefs bathymétriques. Le modèle est forcé à la limite marine par les composantes harmoniques de la marée (CST France, SHOM), aux limites amont des fleuves par les débits solides et liquides issus de la Garonne, de la Dordogne et de la Charente, et, sur tout le domaine, par les vents issus du modèle Météo-France haute résolution AROME (Bénard, 2003). Les courants généraux du modèle MARS-3D servent alors de forçages au modèle sédimentaire MUSTANG. Les vagues calculées par WW3 sont ajoutées en tant que forçage pour ce même modèle sédimentaire MUSTANG (contraintes de cisaillement au fond).

2.2.4.3 Module sédimentaire MUSTANG

Les concentrations en MES dans l'ensemble de la colonne d'eau et la dynamique du sédiment dans le compartiment du fond sédimentaire (en termes de nature et d'épaisseur) sont simulées par un module sédimentaire MUSTANG (MUD Sand TRANsport modelinG). Celui-ci est dérivé de l'ancien module sédimentaire MIXSED, décrit par Le Hir et al.

(2007), Grasso et al. (2018) puis par Mengual et al. (2017). Couplé au modèle hydrodynamique précédemment décrit, le module sédimentaire MUSTANG, modèle multicouches et multiclassés (sable/vase), reproduit les processus d'érosion, de dépôt, de transport en suspension et de consolidation. À partir d'une couverture sédimentaire initiale et par les vagues issues du modèle WaveWatch III, le module permet de simuler la concentration et les flux des sédiments en suspension, l'épaisseur et la nature du lit sédimentaire et son évolution. Le compartiment sédimentaire au fond fonctionne à partir d'un nombre de couches variable dont l'épaisseur est elle-même variable. Compte tenu des objectifs de l'étude en présence et des « courtes » périodes modélisées (échelles annuelles à pluri-annuelles, mais inférieures à la décennie), l'impact sur l'hydrodynamique des évolutions morphologiques des reliefs bathymétriques n'a pas été considéré (approche morphostatique). Le fonctionnement de ce module sédimentaire nécessite de définir un nombre fini de classes de sédiments, auxquelles sont associés un type de sédiments, une taille de particules et des caractéristiques intrinsèques à la classe considérée (e.g. vitesse de chute, érodabilité). La définition de la couverture sédimentaire initiale, choisie uniforme selon la verticale, nécessite de préciser une épaisseur sédimentaire initiale et un pourcentage de chaque classe initialement présente dans cette épaisseur de sédiments, ce qui détermine un stock de particules disponibles initialement dans chaque maille du domaine.

2.2.4.4 Paramètres du Modèle MARS/MUSTANG

Les modèles de courant et l'advection des sédiments en suspension ont été calculés avec le modèle tridimensionnel à surface libre MARS3D (3D hydrodynamic Model for Applications at Regional Scale, IFREMER) décrit en détail par Lazure et Dumas (2008). Il résout les équations primitives sous les hypothèses classiques de Boussinesq et de pression hydrostatique. La configuration du modèle s'étend de 40°58'39"N à 55°N en latitude, et de 18°2'1"O à 9°30'E en longitude avec une résolution horizontale uniforme de 2500 m (822×624 points de grille horizontale). La discrétisation verticale est basée sur 40 couches sigma (non utilisée dans cette thèse). La viscosité et la diffusivité verticales pour la température, la salinité et la quantité de mouvement ont été obtenues en utilisant la fermeture de turbulence k- ϵ de Rodi and Mansour (1990). L'ensemble des forçages utilisés dans la simulation sont résumés dans le tableau suivant 2.2.4.4.

L'hydrodynamique, l'érosion, l'advection, la diffusion et le dépôt ont été calculés avec MARS/MUSTANG 3D. Les sorties du modèle utilisées dans la suite des travaux sont les concentrations en matières minérales en suspension à la surface. Celles-ci sont définies en trois classes dépendant de leur granulométrie : a/ vase b/ sable (de < 63 μm à 2 mm), et c/ le gravier (>2 mm). Comme le travail de la thèse se concentre sur les sédiments à

Forçage	Description	Paramètres
Conditions limites	GLORYS global ocean reanalysis	Courant 3D Température et Salinité
Vague	WaveWatch III	Hs Vitesses orbitales
Vent	Modèle ARPEGE	Vitesse vent - 10 m Température air 2 m Pression atmos.
Marée	FES2004	14 composantes
Apport fluviatile	Données Agences de l'eau	Débit Concentration MES

TABLE 2.1 – Tableau récapitulatif des forçages utilisés pour l’initialisation du modèle MARS-MUSTANG

la surface, la classe des graviers n’a pas été conservée, car définie dans le modèle MARS-MUSTANG pour modéliser le transport du charriage (Mengual et al., 2019)⁴. La valeur retenue étant l’addition des concentrations des classes Sable et Vase (en kg/m³).

2.3 Conclusion

Ce chapitre se focalise sur la zone sélectionnée pour l’étude. Le golfe de Gascogne présente en effet une grande variété de processus et d’environnements aussi bien à la côte qu’au large. La sédimentologie du fond du GdG peut être divisée en trois principaux types de fonds marins : une grande zone vaseuse située au milieu du plateau et appelée "Grande Vasière", des zones côtières caractérisées par des fonds rocheux et sableux, et le rebord du plateau avec une prédominance de roches. Les limites du plateau continental sont découpées par les canyons qui sont à l’origine de courants transverses (IPC).

De nombreux produits numériques sont disponibles pour étudier le golfe de Gascogne. Les produits qui ont été sélectionnés pour les différentes étapes de l’étude ont été présentés. Les sorties de modèle MARS/MUSTANG paramétré par Mengual (2016) est utilisé pour l’OSSE mise en place dans le chapitre 4. La bathymétrie Sextant, les sorties de WaveWatch III et les coefficients de marée du SHOM seront quand à eux utilisés comme forçages pour le modèle de prévision. La base d’observation de MODIS de Gohin et al. (2005) est utilisée dans l’ensemble des expérimentations.

4. Cette configuration de modèle n’est pas éligible à la diffusion

RECONSTRUCTION DE DONNÉES SPATIALISÉES

Dans cette thèse, par données spatialisées nous entendons un ensemble d'information sur une zone géographique déterminée. Par exemple en océanographie, il peut s'agir de carte d'observations satellitaires de la surface de l'océan ou des grilles de sorties de modèles. L'absence d'information sur une grille de données spatialisées peut intervenir pour des raisons diverses (observations satellites manquantes, problème de calibration de capteur, impossibilité d'échantillonner dans certaines zones, etc.). Pour compléter cette absence d'information il existe des méthodes dites d'interpolation capables de construire ou reconstruire les données manquantes. Les méthodes d'interpolation, appliquées en océanographie, conduisent à estimer un état de l'océan sur une grille structurée d'un modèle numérique à partir d'observations hétérogènes dans le temps et dans l'espace. Plusieurs méthodes comme l'Interpolation Optimale (cf. Section 3.1.1) ou le DinEOF (cf. Section 3.1.2) sont communément utilisées dans la littérature et font aujourd'hui office de référence (Alvera-Azcárate et al., 2015).

Ces méthodes statistiques ou déterministes sont aujourd'hui complétées par les apports des réseaux de neurones. En effet, l'essor de l'apprentissage machine a permis la mise en place de nouvelles méthodes d'interpolation avec des résultats encourageants (Fablet et al., 2018; Gusarov and Kalyuzhnaya, 2017). Ces nouvelles méthodes proposent des architectures permettant d'aller plus loin en termes de performances d'interpolation de données tout en profitant de la quantité de données disponibles en constante augmentation. Ce chapitre propose de définir les principales méthodes d'interpolation utilisées dans ce travail, à la fois des méthodes linéaires, mais aussi basées sur des réseaux de neurones, une description de l'architecture retenue sera effectuée et un état de l'art sur les méthodes basées sur les réseaux de neurones sera proposé. Enfin, la méthode développée et paramétrée dans la cadre de la thèse, méthode dite 4DVarNet, sera présentée.

3.1 Méthodes d'interpolation et extrapolation

Un algorithme d'interpolation est un modèle mathématique auquel est associé un état à reconstruire. Cet algorithme combine de manière optimale diverses sources d'informa-

tions sur l'état de l'océan recherché (mesures). Le critère d'optimalité pour cette analyse est défini de manière statistique, le plus souvent par la minimisation d'une variance d'erreur de l'état reconstruit. Pour satisfaire ce critère, il faut alors connaître les erreurs des diverses sources d'information : celles des observations (erreurs instrumentales, de représentativité ...). De manière classique, elles sont souvent supposées de nature gaussienne. Ces erreurs sont donc caractérisées par une matrice de covariance d'erreurs d'observations (classiquement notée R).

3.1.1 Géostatistique et Interpolation Optimale

L'interpolation optimale (OI, pour Optimal Interpolation) est une méthode d'interpolation très répandue dans les secteurs de l'océanographie et météorologie depuis sa conception dans les années 60 (Høyer and She, 2007). Le principe de l'interpolation optimale est de chercher une combinaison linéaire optimale entre les observations et les états du système. Cette recherche se base sur la matrice de covariance des écarts entre les valeurs des observations et celles reconstruites. L'OI est ainsi nommée parce qu'il s'agit d'un estimateur à variance minimale.

En météorologie ou océanographie, le produit matriciel ou le calcul de matrices inverses peut être de grande dimension. Dans une formulation variationnelle du problème, l'OI peut être vue comme un système d'équations scalaires, une pour chaque variable du modèle. Pour chaque variable, l'incrément d'analyse est donné par la ligne correspondante d'une matrice intitulée K , aussi appelé BLUE pour Best Linear Unbiased Estimator, et définie selon la première des deux relations suivantes :

$$K = BH^T(HBH^T + R)^{-1} \quad (3.1)$$

$$x = x_b + K(y - Hx_b) \quad (3.2)$$

Avec :

- x l'état du système à reconstruire
- x_b l'ébauche (background ou a priori) du système avant estimation par interpolation
- y les observations du système
- H l'opérateur d'observation de l'information a priori
- B La matrice de covariance d'erreur a priori
- R La matrice de covariance d'erreur du modèle d'observation

Pour chaque élément du vecteur d'état, peu d'observations déterminent l'incrément d'analyse i . L'algorithme est alors le suivant :

- Pour chaque composante $x(i)$ du vecteur d'état, sélectionner un petit nombre ϵ d'observations, jugées significatives pour corriger $x(i)$.
- Calculer les composantes correspondantes du vecteur d'innovation $(y - Hx_b)_i$, ainsi

que les covariances d’erreur entre les $x(i)$ et le vecteur d’état interpolé aux points d’observation (i.e. les ϵ coefficients significatifs correspondants de la ligne i de BH^T), et les sous-matrices $\epsilon \times \epsilon$ correspondantes aux matrices de covariance d’erreur d’ébauche et d’observation (formées par les restrictions de HBH^T et R aux observations sélectionnées).

- Inverser la matrice $\epsilon \times \epsilon$, définie positive, restriction de $(HBH^T + R)$ aux observations sélectionnées.
- Multiplier cet inverse par la ligne i de BH^T pour obtenir la ligne correspondante de K . On peut gagner encore en temps de calcul en ne calculant pas l’inverse de la matrice, mais en résolvant directement le système linéaire correspondant (par exemple avec la méthode de Choleski).

Le point crucial réside dans le choix des observations considérées comme significatives. Généralement, la zone d’influence des observations sur l’analyse est assez restreinte spatialement et temporellement. On choisit en pratique les observations disponibles en fonction de la matrice de covariance a priori (en temps et espace) du point considéré.

L’OI rencontre plus spécifiquement trois difficultés. La première est son incapacité à traiter de manière dynamique l’évolution de l’incertitude pendant la prévision à court terme servant à construire l’ébauche. Dans cette méthode en effet, la matrice des covariances d’erreur (dite matrice B) est figée au début de la prévision et n’évolue plus ensuite. Enfin, troisième difficulté, l’OI dans le cas où trop d’observations sont manquantes, elle n’apporte aucune information autre que l’*a-priori* (background). Or celles-ci, de par leur couverture, constituent la solution pour obtenir les données globales nécessaires à la prévision mais se heurte à un problème de ressources machines lors de la résolution mathématique des modèles contenant des matrices de grandes dimensions. Ainsi, il est admis de mettre en oeuvre d’autres méthodes capables de travailler avec une réduction de la taille des données (Lguensat et al., 2017; Velliangiri et al., 2019).

3.1.2 Analyse en composantes principales et méthode DinEOF

Une des méthodes d’interpolation de données utilisée en océanographie est la méthode DinEOF (Alvera-Azcárate et al., 2005). Elle se base sur une décomposition des données d’entrée appelée Analyse en Composante Principale (PCA en anglais) que l’on trouve aussi parfois appelée Empirical Orthogonal Function (EOF).

3.1.2.1 Analyse en composantes principales

Les objectifs poursuivis par une PCA (Principal Component Analysis) sont :

- la représentation graphique “optimale” des données (lignes), minimisant les déformations du nuage des points (de dimension p), dans un sous-espace E_q de dimension q ($q < p$).

- la représentation graphique des variables dans un sous-espace F_q en explicitant au "mieux" les liaisons initiales entre ces variables.
- la réduction de la dimension (compression), ou approximation de l'état du système par un tableau de rang q ($q < p$).

De façon générale, un modèle s'écrit : Observation = Modèle + Bruit, assorti de différents types d'hypothèses et de contraintes sur le modèle et sur le bruit. En PCA, la matrice des données est supposée être issue de l'observation de n vecteurs aléatoires indépendants x_1, \dots, x_n , de même matrice de covariance σ , toutes contenues dans un sous-espace affine de dimension q ($q < p$). Éliminer le bruit revient donc à réduire la dimension.

Le résultat d'une analyse PCA se traduit par une matrice de valeurs propres et de vecteurs propres de dimensions réduites qui, en effectuant l'inverse de la transformation, permettent de reconstruire les variables dans leur dimension de départ. Chaque colonne de valeurs propres permettant de caractériser une grande tendance du système étudié. Le nombre maximum de valeurs propres (aussi appelés modes) est égale à la dimension des données en entrée, reconstituant alors 100% du système.

Une application directe des PCA en contexte d'interpolation de données est DinEOF (Date INterpolating Empirical Ortoogonal Functions, Alvera-Azcárate et al. (2005)).

3.1.2.2 Méthode DinEOF

Les bases de la méthode sont établies dans Beckers and Rixen (2003). Il s'agit d'une méthode itérative pour calculer les valeurs de champ aux positions manquantes. Dans un premier temps, une moyenne spatiale et temporelle est retirée des données analysées, et les données manquantes sont initialisées à zéro ou selon l'état initial souhaité (une OI par exemple). Ensuite, une PCA est calculée de ce champ, et les données manquantes sont remplacées par les valeurs obtenues par la décomposition PCA. Après cela, une deuxième transformation EOF est calculée, et toute la procédure est répétée et ainsi de suite. Cette procédure est répétée jusqu'à ce qu'un critère de convergence pour les valeurs des données manquantes, spécifié par l'utilisateur, soit atteint. Dans le cadre de ce travail, il s'agit d'une métrique de RMSE. Le paramètre critique de cette méthode est le nombre d'EOF. Celui-ci est déterminé par une validation croisée : quelques données valides (généralement 1% des données totales) sont prélevées au début de la procédure et marquées comme étant des données manquantes. De manière itérative, un modèle de convergence est actualisé avec l'ajout de nouveaux vecteurs propres lorsqu'un plateau est atteint. lorsque les variations deviennent inférieures au seuil de convergence définis, la reconstruction est considérée comme terminée et complète (cf. Figure 2 de Alvera-Azcárate et al. (2009)).

3.1.3 Assimilation de données

L'assimilation de données est une méthode statistique qui vise à estimer des paramètres ou variables d'un modèle en combinant de façon optimisée prévisions du modèle et les observations, en prenant en compte leurs incertitudes. Autrement dit, celle-ci consiste à combiner de façon optimale les observations, récupérées par différents moyens (résultats, satellites), avec un modèle dynamique afin de proposer les meilleures prévisions possibles. Ces informations sont souvent hétérogènes en nature, en quantité et en qualité.

Il existe plusieurs approches pour l'assimilation de données. Ces méthodes peuvent être classées suivant deux catégories : l'approche stochastique basée sur la théorie de l'estimation statistique (filtre de Kalman,..) et l'approche variationnelle basée sur la théorie du contrôle optimal. De plus, pour que le filtre de Kalman soit optimal, les erreurs doivent être décorréliées en temps, alors que les méthodes variationnelles n'ont pas besoin de cette hypothèse.

3.1.3.1 Notations et définition mathématique du problème

La reconstruction d'une série temporelle complète d'images de paramètres géophysiques, issus d'observations satellitaires, peut être considéré comme un problème d'assimilation de données. Ce problème suit généralement une approche suivant une formulation de l'espace d'état sous la forme suivante :

$$x(t) = M[x(t-1), \eta(t)] \quad (3.3)$$

$$y(t) = H[x(t)] + \epsilon(t) \quad (3.4)$$

Avec :

- $x(t)$: Vecteur d'état. Ce vecteur représente l'ensemble des variables du modèle. Il est obtenu par propagation via le modèle M depuis l'état initial. Ainsi, $x(t)$ correspond à l'état au temps t
- $y(t)$: Vecteur d'observation. Ce vecteur représente les observations disponibles pendant l'intervalle de temps correspondant au cycle d'assimilation. Celles-ci sont de natures très diverses et proviennent de sources multiples (satellites, données in-situ)
- M : Modèle. Le modèle représente l'évolution temporelle du système.
- H : Opérateur discret. Cet opérateur permet de faire le lien entre le vecteur d'état du modèle et les observations disponibles. En effet, celles-ci ne sont pas nécessairement localisées sur les différents points de grille du modèle, ou ne sont pas de même nature que les variables du modèle.
- η : Incertitudes du modèle. Ces incertitudes sont dues au bruit et approximation de calcul.

— ϵ : Erreur d'observation.

3.1.3.2 Approche stochastique : Filtre de Kalman et Analogues

La Méthode AnDA (Analogue Data Assimilation) est une méthode d'assimilation de données. Cette méthode utilise une base d'analogues couplée à un filtre de Kalman. Cette méthode permet d'introduire les méthodes d'assimilation de données suivant l'approche stochastique.

3.1.3.2.1 Filtre de Kalman Le principe du filtre de Kalman repose sur la recherche du B.L.U.E. (Best Linear Unbiased Estimator). Il s'agit d'ajuster l'état du modèle afin qu'il coïncide le mieux possible avec les observations présentes. Celles-ci sont disponibles à divers instants t_k , l'indice k permettant ainsi par la suite de repérer au niveau de quelle observation se situe l'algorithme. L'assimilation de données via le filtre de Kalman se déroule en deux phases : une phase d'analyse et une de prévision. L'étape de prévision permet de fournir, comme son nom l'indique, une prévision de l'état courant du système. Elle va nécessiter l'emploi du modèle : l'état courant va être obtenu après intégration des équations du modèle depuis l'état analysé précédent du système. Cette phase va fournir également la matrice de covariance des erreurs de prévision, P_f , correspondant à la propagation de l'erreur d'analyse précédente via le modèle, à laquelle on ajoute une estimation Q de l'erreur de modèle. L'étape d'analyse va réaliser une estimation de l'état du système en corrigeant l'état courant à partir des écarts aux observations, et va fournir la matrice de covariance des erreurs d'analyse, P_a . Cela va nécessiter la connaissance de la matrice de covariance de l'erreur d'observation, R , regroupant les erreurs de mesure et de représentativité par la grille spatio-temporelle du modèle. Le modèle M ainsi que l'opérateur d'observation H sont, dans ce cas de figure, supposés linéaires. Le principe de l'assimilation via un filtre de Kalman est représenté en figure 3.1.

3.1.3.2.2 Méthode d'assimilation suivant les analogues La méthode AnDA (Analogue Data Assimilation) se caractérise par le fait qu'elle propose de remplacer le modèle dynamique M par un opérateur de prévision analogique noté A . Cet opérateur est créé grâce à un catalogue de données (C) (Lguensat et al., 2017). Ce catalogue est alors utilisé en formant des paires d'analogues et successeurs sous forme de vecteurs d'états linéaires utilisés dans A pour prévoir le $x(t + 1)$ (Figure 3.2). Ceux-ci sont pondérés à chaque itération en fonction de l'observation. La distance temporelle de corrélation est paramétrable par l'utilisateur, à l'image de l'OI. La phase d'assimilation et de lissage se met en place via une adaptation d'un filtre/lisseur de Kalman d'ensemble (EnKF / EnKS). Le filtre de Kalman est très utilisé dans le traitement de données bruitées ou partielles. Son principe est de prévoir un état $t + 1$ en fonction des données récoltées (Bertino and Evensen, 2003; Tandeo et al., 2015). Ces états sont calculés à partir des données d'un

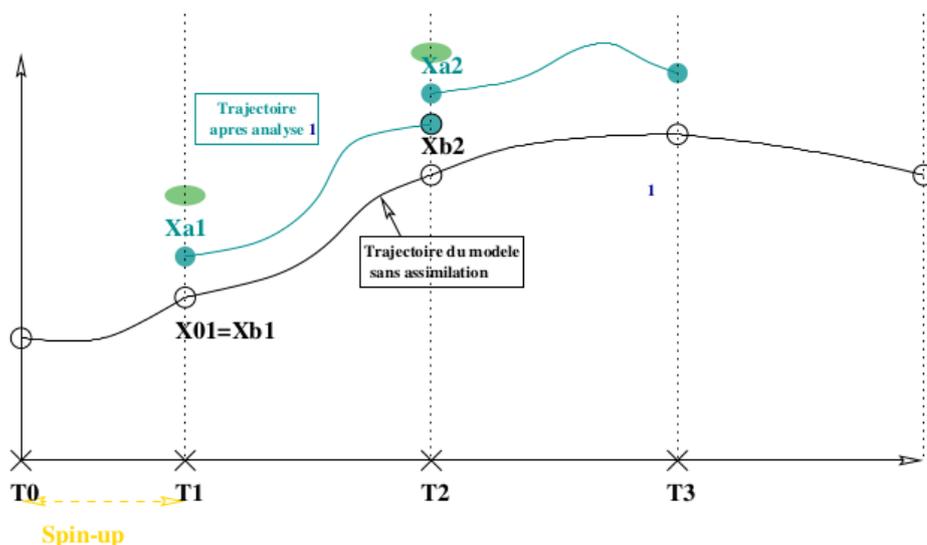


FIGURE 3.1 – Principe du filtrage en assimilation de données d’après Simon (2007). Les points verts correspondent aux observations, la trajectoire noire à celle du modèle et les trajectoires bleues aux différentes séquences de reconstruction selon le filtre

instant présent (filtre) puis sont lissés en vérifiant leurs corrélations avec des données antérieures. Il est alors possible pour l’utilisateur de définir le nombre de poids à utiliser pour la reconstruction, jusqu’à une valeur maximum égale au nombre de paires d’analogues/successeurs disponibles. La méthode AnDA distingue dans sa reconstruction les estimations réalisées à partir des observations et celles provenant du modèle dynamique (les analogues-successeurs). Dans AnDA, le poids donné à ces deux composantes varie en fonction du nombre de données manquantes dans les observations. Plus il y aura d’observation et plus elles pèseront dans l’équation pondérant le modèle dynamique. Il existe plusieurs modèles dynamiques en fonction de la paramétrisation de la moyenne et la covariance, celles-ci sont détaillées dans Lguensat et al. (2017).

3.1.3.3 Approche variationnelle avec la méthode 4DVar

Introduites par Sasaki dès 1955 (Sasaki, 1955), les méthodes variationnelles sont basées sur la minimisation d’une fonction coût J mesurant les écarts entre l’état estimé et les données disponibles. Alors que dans le cadre du filtrage stochastique les observations n’étaient utilisées qu’une seule fois et n’influaient pas sur les calculs des diverses estimations antérieures, l’approche variationnelle va opérer globalement sur l’ensemble des observations disponibles dans la fenêtre d’assimilation pour réaliser la minimisation. Ainsi cette approche permet de calculer la trajectoire optimale du système et non plus la meilleure estimation de l’état à un instant d’observation.

La méthode 4DVar a donc pour but d’obtenir la trajectoire optimale sur une fenêtre de

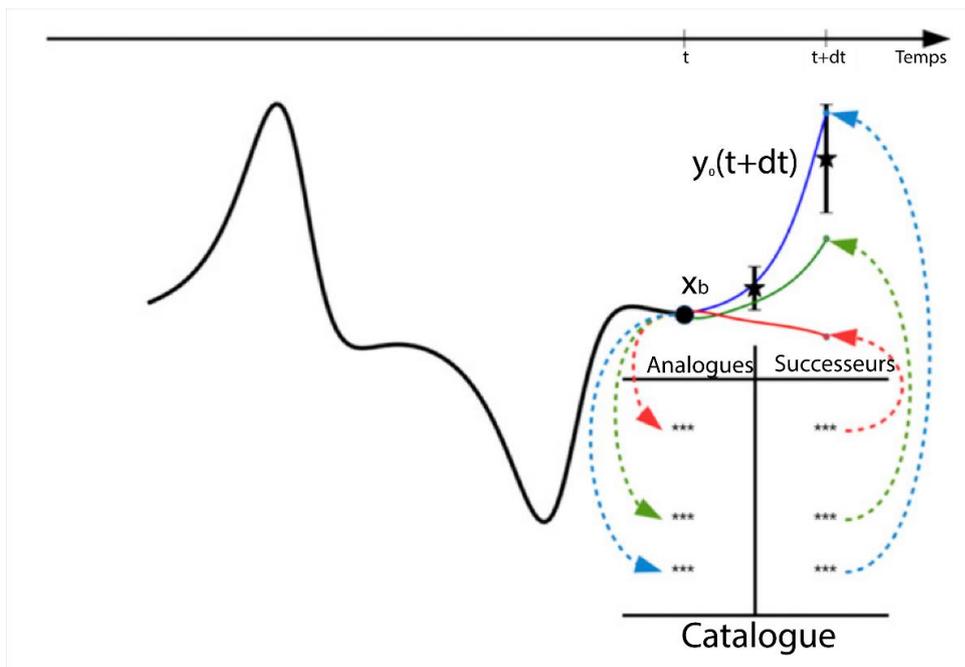


FIGURE 3.2 – Méthodes des analogues successeurs à partir d'un signal d'observation bruité. La prédiction s'effectue en fonction des observations (étoiles) et de leurs incertitudes associées. D'après Lguensat et al. (2017)

temps donnée, la période d'assimilation. Pour cela il est nécessaire de prendre en compte toutes les observations contenues dans cette fenêtre. Nous supposons que ces observations sont localisées temporellement aux N instants (t). À partir d'une ébauche x_b de la condition initiale pour la phase d'assimilation sur une fenêtre donnée, l'algorithme 4DVar va fournir une condition initiale optimisée (ou état analysé) x_a , qui sera intégrée par le modèle afin d'obtenir la trajectoire optimale. Cet état analysé est obtenu en minimisant la fonction coût appelée J . Des versions plus complexes du 4DVar permettent l'optimisation de n'importe quel autre paramètre du modèle (forçages, conditions limites, etc.) (Moore et al., 2019).

Si les opérateurs H et M sont linéaires, J est alors quadratique, d'où l'unicité de la solution. De plus si le modèle est parfait (l'erreur modèle est supposée nulle), il existe une certaine équivalence entre les solutions trouvées par le 4DVar et le filtre de Kalman : il est possible de montrer qu'en partant des mêmes données l'analyse 4DVar à la fin de la période d'assimilation est égale à celle du filtre de Kalman au même instant 3.3. Dans le cadre de l'océanographie ou de la météorologie, ces opérateurs ne sont pas linéaires en général : on utilisera alors leurs linéaires tangents.

3.2 Apport des réseaux de neurones

Bien qu'existant en théorie depuis les années 1950 (Rosenblatt, 1957), la mise en œuvre informatique concrète des réseaux neuronaux artificiels (NN) n'a eu lieu que dans

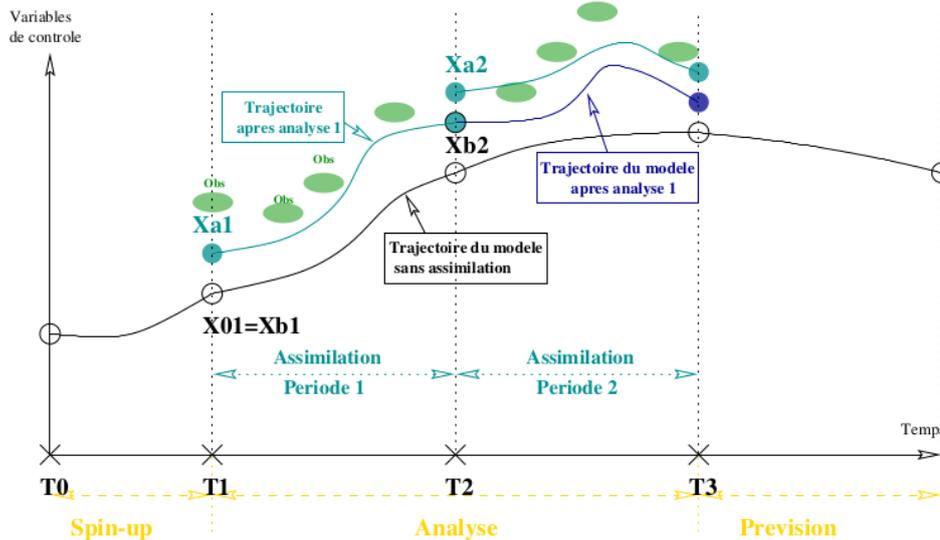


FIGURE 3.3 – Assimilation par le 4DVar d’après Simon (2007). Les points verts correspondent aux observations, la trajectoire noire à celle du modèle et les trajectoires bleues aux périodes d’assimilation des données. La section violette correspond à la trajectoire du modèle de prévision

les années 1990. Ces NN sont utilisés dans les sciences de l’environnement pour prédire des variables clés et trouver des relations à partir d’ensembles de données écologiques, souvent avec des distributions spatio-temporelles complexes (non linéaires) et bruitées (Lek et al., 1996). Les réseaux neuronaux sont en effet des fonctions d’approximation qui permettent de modéliser divers ensembles de données en particulier des ensembles complexes et bruités. Ils sont donc des outils adaptés pour dériver des variables à partir de paramètres définis, notamment lorsque les relations exactes sous-jacentes sont difficiles à formaliser ou inconnues, comme présentés dans la section 2.2.3. En océanographie spécifiquement, le potentiel des réseaux de neurones a été largement testé, notamment pour dériver des variables climatiques (Barth et al., 2020a; Lek et al., 1996). Ainsi, un NN est un ensemble de processeurs élémentaires, les neurones, largement connectés entre eux et capables d’échanger des informations grâce aux connexions par lesquelles ils sont reliés. Ces connexions sont directionnelles et à chaque connexion est associé un réel, appelé "poids" de la connexion. Les réseaux de neurones mettent à jour ces poids de manière continue. Il existe donc une boucle de rétro-action mise en œuvre dans la plupart des réseaux de neurones. L’information est transmise d’un neurone à l’autre, pondérée par le poids. Les biais sont également des valeurs numériques qui sont ajoutées une fois que les poids sont appliqués aux valeurs d’entrée. Les fonctions d’activation standardisent ou normalisent la donnée de sortie avant qu’elle ne soit transmise aux neurones suivants. Ces fonctions sont paramétrables et aident les réseaux de neurones à apprendre et à s’améliorer. Les NN sont des méthodes d’approximation adaptées à de nombreux ensembles de données

(Krinitskiy et al., 2019). L'un des principaux avantages de ces méthodes est leurs capacités à reconnaître et à exploiter des relations qui ne sont pas prédéfinies dans les données (contrairement aux techniques de régression) et qui ne doivent pas être expliquées par des équations. Ici les NN permettent d'obtenir des résultats meilleurs qu'avec les techniques de régression tout en optimisant le temps de calcul des prédictions du modèle, une fois entraîné. De plus, l'intégration de plusieurs variables en entrées dans le calcul du modèle sans avoir à redéfinir les équations rendent leur utilisation plus flexible, notamment dans les études de sensibilités Chen et al. (2017).

Cette section présente plusieurs points. Dans un premier temps, une définition des réseaux de neurones sera proposée présentant les étapes et paramètres nécessaires pour le fonctionnement d'un réseau de neurones (NN). Ensuite la méthode 4DVarNet utilisée dans ce travail pour répondre aux objectifs de prévision et d'interpolation, sera présentée et son fonctionnement détaillé.

3.2.1 Fonctionnement d'un réseau de neurones

Un neurone est un modèle caractérisé par un état interne et une fonction d'activation. Les différents types de neurones se distinguent par la nature de leur fonction d'activation notée g . Les principaux types sont :

- linéaire : fonction identité
- seuil : $g(x) = 1_{[0,+\infty]}(x)$
- sigmoïde : $g(x) = \frac{1}{1+e^x}$
- ReLU (Rectified Linear unit) : $g(x) = \max(0, x)$

Ces neurones peuvent être agrégés sous forme de couches qui elles-mêmes peuvent se concaténer et former des réseaux de neurones. Un exemple de réseau de neurones est un perceptron multicouche (PMC) (Figure 3.4), un réseau composé de couches successives. Une couche est un ensemble de neurones n'ayant pas de connexion entre eux. Une couche d'entrée lit les signaux entrants, un neurone par entrée x_j , une couche en sortie fournit la réponse du système. Selon les auteurs, la couche d'entrée qui n'introduit aucune modification n'est pas comptabilisée. Une ou plusieurs couches cachées participent au transfert d'informations. Dans un perceptron, un neurone d'une couche cachée est connecté en entrée à chacun des neurones de la couche précédente et en sortie à chaque neurone de la couche suivante. Un perceptron multicouche réalise donc une transformation des variables d'entrée selon l'équation suivante :

$$Y = f(X_1, \dots, X_n; \alpha) \tag{3.5}$$

avec :

- Y : Cible du modèle
- X : Variable d'entrée

- α : Le vecteur contenant chacun des paramètres α_{jkl} de la j ème entrée du k ème neurone de la l ème couche.

Le modèle ainsi construit a besoin d'ajuster les poids entre les différentes couches le composant pour répondre au problème posé, on parle alors d'entraînement (Figure 3.4-1). Le jeu de données d'entraînement est alors divisé en deux jeux distincts. Le premier sert à la phase d'entraînement et le second à la phase de test. Les données utilisées pour développer le réseau de neurones sont ainsi séparées en deux sous-jeux, de manière aléatoire, le jeu de la phase de test étant un sous-ensemble représentatif de la diversité des valeurs prises par les variables. Cette séparation est souvent faite selon les proportions 70%-30%. Cette phase de test détermine la capacité de généralisation du réseau de neurones (Bishop, 1994). Un premier passage est effectué avec les données d'entraînement tirées aléatoirement (batch) et permet un premier ajustement des poids du système, il aboutit à une valeur d'apprentissage appliquée à la métrique d'évaluation définie. Un second passage est alors effectué sans ajustement des poids avec le jeu de données de test. Ce processus peut être répété plusieurs fois de manière successive, ce paramètre s'appelle le nombre d'epochs.

Entre chaque epochs une évaluation des résultats de l'apprentissage est effectuée (Figure 3.4-2). Selon les métriques de validation définies (fonction de coût) le modèle est jugé comme s'approchant ou non des objectifs.

Afin de permettre l'apprentissage du modèle, la phase d'optimisation utilise les informations de la fonction de coût et permet d'ajuster les valeurs des points du NN (Figure 3.4-3). Un optimisateur est alors la fonction associée à cette action de caractérisation des erreurs. Sa nature varie en fonction des besoins et des objectifs du réseau de neurones. Un exemple commun est la descente de gradient. La descente de gradient est un algorithme d'optimisation basé sur une fonction convexe dont les paramètres sont modifiés de manière itérative afin de minimiser une fonction donnée jusqu'à son minimum local. La descente de gradient cherche à réduire itérativement une fonction de coût en se déplaçant dans la direction opposée à celle de la pente la plus forte. La valeur de ce déplacement est fixée par le taux d'apprentissage. Plus celui-ci est grand et plus les évolutions seront rapides, mais entraînent des sauts qui ne permettent pas de converger. À l'inverse un taux d'apprentissage trop faible sera plus gourmand en termes de ressources et pourra demander beaucoup plus d'itérations pour être efficace. Une fois l'optimisation effectuée les poids sont réajustés par rétropropagation. La technique de rétropropagation (Backpropagation) est une méthode qui permet de calculer le gradient de l'erreur pour chaque neurone du réseau, de la dernière couche vers la première. Cette technique consiste à corriger les erreurs de façon hiérarchisée. Dans le cas des réseaux de neurones, les poids synaptiques qui contribuent à engendrer une erreur importante se verront modifiés de manière plus significative que les poids qui ont engendré une erreur marginale. La manière de quantifier cette erreur peut varier selon le type d'apprentissage à effectuer. En appliquant cette

étape plusieurs fois, l'erreur tend à diminuer et le réseau offre une meilleure prédiction, le système converge. Le système peut aussi ne pas converger et demande alors d'ajuster des paramètres du modèle, son architecture ou les données d'entrée.

Une fois le réseau entraîné, celui-ci est à même d'utiliser la combinaison de poids apprise pour l'appliquer à d'autres jeux de données d'entrée (respectant les contraintes de dimension de la couche d'input).

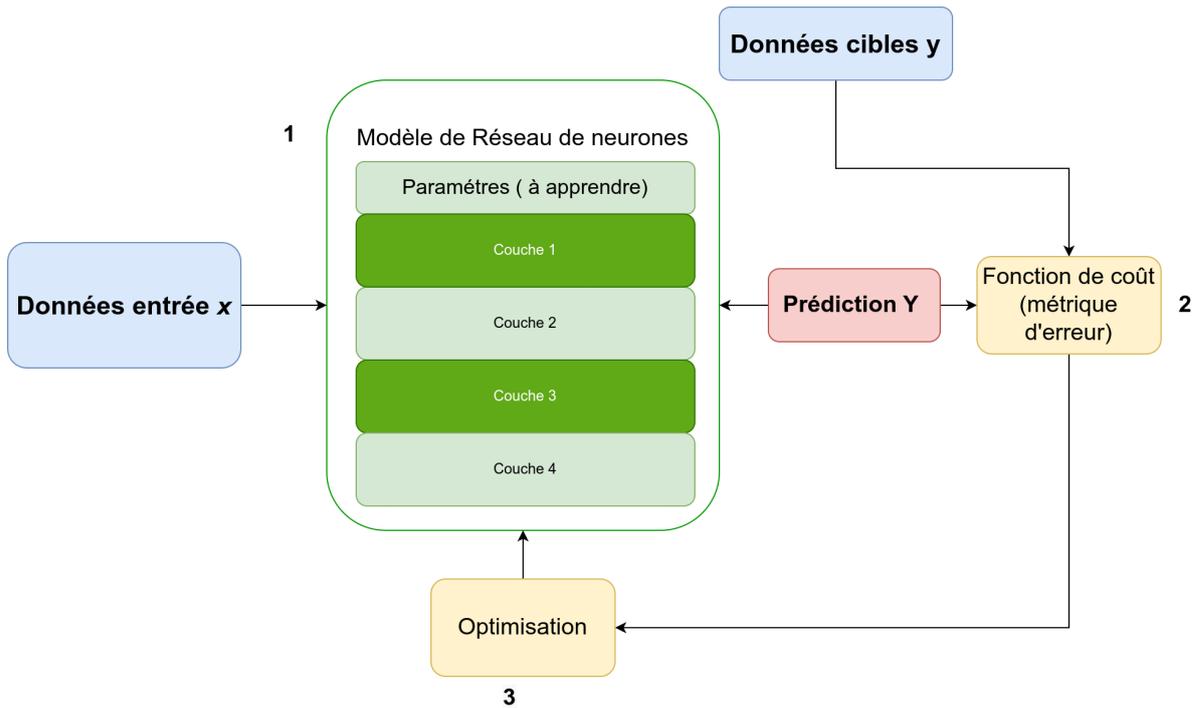


FIGURE 3.4 – Schéma représentatif des étapes principales d'apprentissage par un réseau de neurones. Les éléments bleus sont relatifs aux entrées de modèle, le rouge relatif aux sorties. Le vert comprend l'architecture du modèle. Les étapes en jaune correspondent aux actions de rétropropagation.

De nombreux types de réseaux de neurones existent et correspondent à des besoins spécifiques.

3.2.2 Assimilation variationnelle avec réseaux de neurones (4DVar-Net)

Le modèle de réseau de neurones mis en oeuvre dans cette thèse est le 4DVarNet. Celui-ci a été utilisé selon différentes configurations en fonction des données à reconstruire. Dans un premier temps, il s'agit de reconstruire des observations de SSSC (sea Surface Suspended Sediment Concentration) dans le cadre d'une validation avec apprentissage sur des données issues d'un modèle couplé hydrodynamique et sédimentaire (cf. section 2.2.4.2). Le modèle a ensuite été utilisé pour l'interpolation d'observations issues du capteur satellite de la couleur de l'eau MODIS, cette fois avec une base d'apprentis-

sage uniquement composée d’observations incomplètes (nuages) (cf. section 6.4.2). Enfin le modèle a été configuré pour fonctionner en prévision à court terme de la SSSC, avec un apprentissage basé sur les mêmes observations MODIS et un ensemble de forçages intégrés (cf. section 6.4.3). Ces différentes configurations sont décrites au cas par cas dans les chapitres correspondants. Cette section présentera le modèle : dans la façon dont il a été pensé et architecturé.

3.2.2.1 Objectif et formulation

Les stratégies d’assimilation de données sont à l’origine de résultats probants dans les problématiques climatologique et océanographique (Lguensat et al., 2017; Tandeo et al., 2015). Une nouvelle méthodologie s’appuie non plus sur des modèles physiques définis en amont, mais sur des modèles construits autour de la donnée (Data-Driven). Cependant leurs limites se situent principalement dans leur capacité à appréhender des dynamiques complexes et non linéaires. Comme évoqué en section 3.2, les réseaux de neurones permettent de concevoir ces approches et même d’aller au-delà en fonctionnant même avec des ensembles de données incomplets. Au-delà de ses limites, les modèles d’assimilation de données nécessitent une forte paramétrisation du modèle d’observation pour obtenir un modèle d’optimisation satisfaisant. Le 4DVarNet se base sur la résolution d’un problème de minimisation d’une fonction de coût définie sur une certaine fenêtre spatio-temporelle. L’apport principal de la méthode est de combiner deux approches. Il s’agit à la fois d’apprendre le coût variationnel à travers un réseau de neurones tout en remplaçant la descente de gradient classique des méthodes d’assimilation de données par un solveur itératif lui aussi basé sur un réseau de neurones et basé sur des indices de performance. L’objectif ici est de permettre une évolution dynamique du gradient et éviter les blocages dans des minima locaux.

La formulation du problème d’inversion est définie par la minimisation d’une fonction de coût :

$$\hat{x} = \arg \min_x \|y - x\|_{\Omega}^2 + \lambda \|x - \Phi(x)\|^2 \quad (3.6)$$

Dans cette équation Ω fait référence au sous-domaine spatio-temporel où les observations y sont échantillonnées. Afin de garder la lecture des processus spatio-temporels, la formulation matricielle est définie par x et y représentée par des tenseurs 2D+t. Dans une formulation de type assimilation variationnelle, l’opérateur Φ met en oeuvre l’intégration numérique du modèle dynamique défini par l’équation 3.3 D’un point de vue apprentissage statistique, Φ est vu comme un opérateur de projection pour formuler un a priori de x . Le paramètre λ indique l’importance relative du terme de l’opérateur dans le problème de minimisation.

Dans la fonction de coût, le premier terme est une mesure pondérée de la distance

entre x et les données y cible tandis que le second terme ($\|x - \Phi(x)\|^2$) évalue la distance entre la dynamique empirique et la dynamique théorique en considérant le modèle de prévision comme imparfait.

3.2.2.2 L'opérateur ϕ

L'opérateur ϕ peut avoir différentes paramétrisations. Celles-ci sont exposées en détail dans Fablet et al. (2021a,b), et leurs architectures sont décrites dans les sections sur les méthodes dans les chapitres d'application correspondants (chapitres 4,5,6). Nous considérons ici des paramétrisations de type U-net (Fablet et al., 2021a; Gao et al., 2022).

3.2.2.3 L'intégration du solveur Γ

Le solveur Γ adjoint à ϕ est basé sur l'architecture de gradient, défini en fonction de la représentation variationnelle donnée par ϕ . À l'image de ϕ plusieurs modèles de solveurs ont été mis en oeuvre, ceux-ci sont également détaillés dans les chapitres correspondants (chapitres 4,5,6). Quelle que soit la configuration mise en oeuvre, celle-ci est conçue de manière récurrente. Celle-ci permet de re-projeter un nombre de fois prédéfini les données d'observations et relancer un cycle d'apprentissage.

$$\begin{cases} g^{(k+1)} = LSTM[a\nabla_x U_\phi(x^{(k)}, y, \Omega), h(k), c(k)] \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} - \mathcal{L}(g^{(k+1)}) \end{cases} \quad (3.7)$$

Avec :

- a un paramètre scalaire
- $h(k), c(k)$ les états interne du LSTM (réseaux neurones à capacité de rétroaction, capable de travailler avec des séquences de données)
- $\nabla_x U_\phi$ le gradient de la fonction de coût interne de x
- \mathcal{L} une couche linéaire de "dimensionnement" à la sortie du LSTM à l'espace de x .

Avec l'intégration de l'opérateur ϕ et du solveur récurrent Γ pour un couple d'observations y du domaine Ω il est possible de formuler la minimisation de reconstruction sous la forme :

$$\operatorname{argmin}_n \sum \mathcal{L}(x, \tilde{x}) = \psi_{\phi, \Gamma}(x_n^{(0)}, y_n, \Omega_n) \quad (3.8)$$

Avec :

- $\mathcal{L}(x, \tilde{x})$: La somme des erreurs de reconstructions de l'état vrai, avec la projection de l'état vrai en fonction des poids du système.
- $\psi_{\phi, \Gamma}(x_n^{(0)}, y_n, \Omega_n)$: La sortie du 4DVarNet à partir d'une initialisation x^0 et des observations y dans Ω

Cette approche, qualifiée de bout en bout (End-To-End) traduit une intégration complète dans le modèle 4DVarNet de l'ensemble des modules de calculs permettant de reconstruire le champs x à partir des observations partielles y .

3.2.3 Conclusion

Cette partie a présenté les bases des différentes méthodes d'interpolation utilisées dans ce travail. Certaines étant mis en oeuvre dans différentes expérimentations, chaque paramétrisation détaillée est définie dans les chapitres correspondants.

RÉSULTATS SUR LA RECONSTRUCTION DE DONNÉES SPATIALISÉES SIMULÉES (OSSE)

Le chapitre de résultat est présenté sous la forme d'un article publié dans la revue *Remote Sensing*¹ en août 2021. Cet article traite d'un comparatif de méthodes d'interpolation appliquée à une simulation d'observations, dans des expériences ainsi qualifiées usuellement de OSSE (Observing System Simulation Experiment). Dans une OSSE les observations sont simulées, c.-à-d. issues de simulations venant de modèles numériques déterministe. Ici elles proviennent du modèle intitulé MARS/MUSTANG, présenté en section 2.2.4.2.

4.1 Interpolation des SPIM dans le golfe de Gascogne (cas d'études OSSE)

Les SPIM (Suspended Particulate Inorganic Matter) désignent ainsi les particules inorganiques (ou minérales) en suspension dans l'eau.

4.1.1 Résumé

En raison de forçages naturels et anthropiques complexes et interconnectés, la dynamique des sédiments en suspension dans la colonne d'eau océanique reste difficile à comprendre et à surveiller (Le Hir, 2015). Les modèles numériques ne peuvent prendre en compte toutes les variabilités décrites par les ensembles de données in situ et satellitaires. De plus, l'échantillonnage spatio-temporel irrégulier associé aux capteurs satellitaires rend crucial le développement de méthodes d'interpolation efficaces. L'interpolation optimale (IO) reste l'approche classique pour la plupart des produits opérationnels. L'émergence d'architectures pilotés par les données comme des alternatives éventuellement pertinentes avec des capacités accrues pour récupérer les processus à plus petite échelle. Cela est permis grâce à la disponibilité croissante d'observations satellitaires et de simulation nu-

1. <https://www.mdpi.com/2072-4292/13/17/3537>

mériques. Dans cette étude, nous étudions et comparons trois architectures basés sur les données, à savoir une technique basée sur les EOF, un schéma d'assimilation de données analogiques et une approche par réseau neuronal, avec un schéma OI. Nous nous appuyons sur une expérience de simulation de systèmes d'observation basée sur des simulations numériques à haute résolution et des observations satellitaires simulées à l'aide de modèles d'échantillonnage de satellites réels. L'approche par réseau neuronal, qui s'appuie sur une formulation variationnelle de l'assimilation des données pour le problème d'interpolation, surpasse clairement à la fois l'OI et les autres schémas basés sur les données, à la fois en termes de performance de reconstruction et de plus grande capacité à récupérer les événements à haute fréquence. Nous discutons ensuite de la manière dont ces résultats pourraient être transférés à des données réelles, ainsi qu'à d'autres problèmes au-delà des questions d'interpolation, notamment les problèmes de prévision à court terme à partir d'observations satellitaires partielles.

4.1.2 Abstract

Due to complex natural and anthropogenic interconnected forcings, the dynamics of suspended sediments within the ocean water column remains difficult to understand and monitor. Numerical models still lack capabilities to account for the variability depicted by in situ and satellite derived datasets. Besides, the irregular space-time sampling associated with satellite sensors make crucial the development of efficient interpolation methods. Optimal Interpolation (OI) remains the state-of-the-art approach for most operational products. The emergence of data-driven schemes as possibly relevant alternatives with increased capabilities to recover finer-scale processes. Allowed by the increased satellites and models available simulation. In this study, we investigate and benchmark three state-of-the-art data-driven schemes, namely an EOF-based technique, an analog data assimilation scheme, and a neural network approach, with an OI scheme. We rely on an Observing System Simulation Experiment based on high-resolution numerical simulations and simulated satellite observations using real satellite sampling patterns. The neural network approach, which relies on variational data assimilation formulation for the interpolation problem, clearly outperforms both the OI and the other data-driven schemes, both in terms of reconstruction performance and of a greater ability to recover high-frequency events. We further discuss how these results could transfer to real data, as well as to other problems beyond interpolation issues, especially short-term forecasting problems from partial satellite observations.

Keywords : interpolation ; EOF ; data-driven models ; neural networks ; variational data assimilation ; missing data ; suspended surface sediment

4.1.3 Introduction

Marine Sediment fluxes result from a combination of natural and anthropogenic forcing factors (Irabien et al., 2020; Owens, 2020). The main source of sediment load comes from land, and the resuspension of sediments occurs under the effect of tidal currents and waves but also from fish trawling and maritime development, such as harbor sediment dredging and dumping, aggregate extraction, submarine cable installation, offshore wind farm exploitation, oil and gas activities, etc. Due to those complex natural and anthropogenic interconnected forcings, sediment process characterization has to be improved (Brand et al., 2020; Haalboom et al., 2021; Vercruyssen et al., 2017). In this context, numerical models lead to high uncertainty levels in assessing sediment fluxes from their continental source to the shelf edge (Allard et al., 2003; Le Hir et al., 2007; Wang et al., 2013). These issues support the development of new methods to better resolve the sediment dynamics in coastal areas. Today, new approaches tend to make systematic use of available observation datasets (Jin et al., 2021; Moore et al., 2019; Nazeer et al., 2017; Renosh et al., 2017). Observing systems and monitoring networks, however, involve an irregular space-time and possibly scarce sampling of ocean parameter fields, which make the reconstruction of sediment dynamics particularly challenging. This study addresses such issues, with a focus on satellite-derived data for the reconstruction of sea Surface Suspended Sediment Concentration (SSSC).

Operational ocean color products (Sanchez-Arcilla et al., 2021) mainly exploit optimal interpolation and objective analysis methods. These methods rely on the calibration of space-time covariance priors to represent the space-time variability of SSSC fields. Such covariance-based approaches correctly retrieve large-scale processes but generally fail in recovering finer-scale patterns. This typically results in a relatively poor reconstruction of SSSC gradients, in particular those occurring offshore, parallel to the coastline (He et al., 2013). Data-driven approaches, especially EOF-based schemes (Ping et al., 2016), analog methods (Tandeo et al., 2015), and neural network frameworks (Kim et al., 2014; Liu and Wang, 2021; Ouala et al., 2018), have emerged as relevant alternatives to improve the space-time interpolation of satellite-derived products as pointed out by recent studies on sea surface temperature (Alvera-Azcárate et al., 2015; Barth et al., 2020a; Fablet et al., 2023; Ping et al., 2016) and sea surface height (Beauchamp et al., 2020).

This study aims to evaluate the relevance of state-of-the-art data-driven frameworks for the space-time interpolation of SSSC from satellite-derived data. We design an observing system simulation experiment (OSSE) to perform qualitative and quantitative evaluations. As case-study region, we consider the Bay of Biscay, which involves a wide spectrum of natural processes governing the sediment dynamics : winter storms, tides, river plumes, wind-induced turbulence, internal waves, and wave-induced littoral drift (Doray et al., 2018; Tew-Kai et al., 2020), but also anthropological ones mainly on fishing

effort (trawling). We exploit numerical simulation outputs from a MARS-MUSTANG (Mengual et al., 2019) hydrosedimentary model configuration of the Bay of Biscay been exploited to simulate a five-year MODIS-like observation series. For that a realistic cloud cover mask has been applied to the MARS-MUSTANG outputs using real MODIS image series of clouds. The proposed benchmarking experiments include an optimal interpolation as the baseline and four types of data-driven interpolation schemes : namely an EOF-based approach, the analog data assimilation, and two neural-network interpolation schemes.

This article is organized as follows. Section 4.1.4 presents the data used and the proposed benchmarking set up for the Observing System Simulation Experiments (OSSE). Section 4.1.6 details the benchmarked interpolation methods. Section 4.1.7 reports the results of the benchmarking experiments. We further discuss our main contributions and future work in Section 4.1.9.

4.1.4 Case Study and Data

4.1.4.1 Data

The data used in this work are numerical simulations issued from a configuration of the coupled MARS-MUSTANG model simulating oceanic sedimentary fluxes. It includes realistic natural and anthropogenic forcings in the Bay of Biscay. These forcings comprise wind, waves, river plumes, and the general current, including tides. Anthropogenic forcings modeled are trawling from fishing vessels. In terms of particle size distribution, the model takes into account 3 sediment classes according to their mean grain size, namely mud ($<63 \mu\text{m}$), sand (from $<63 \mu\text{m}$ to 2 mm), and gravel ($>2 \text{ mm}$). The field of interest retained in this study is the sea surface total suspended sediments concentration obtained by adding the concentrations from the Sand and Mud classes (in $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$). The gravel class had been defined in the MARS-MUSTANG model to model the bedload transport (Mengual et al., 2019). As this class does not contribute to the SSSC, it was not retained in this study.

Figure 4.1 illustrates the link between the bathymetry and the suspended sediment dynamics. Figure 4.1a displays isobaths of the Bay of Biscay, while Figure 4.1b displays the spatial distribution of the mean SSSC in the area of study. This shows that, as usual, higher SSSC occurs preferably in the vicinity of the coastline. Above the abyssal plain suspended sediment is nearly absent. In particular the threshold of 0.1 mg/L is well correlated with the isobath of 180 m which well represents the shelf edge. Another level of concentration, the 10 mg/L threshold, typically depicts a muddy area of the Armorican shelf also known as the “Grande Vasière”. Following, higher SSSC values at the ocean surface can be seen near estuaries of the main rivers in the area (Gironde, Loire, Vilaine) (Mengual, 2016).

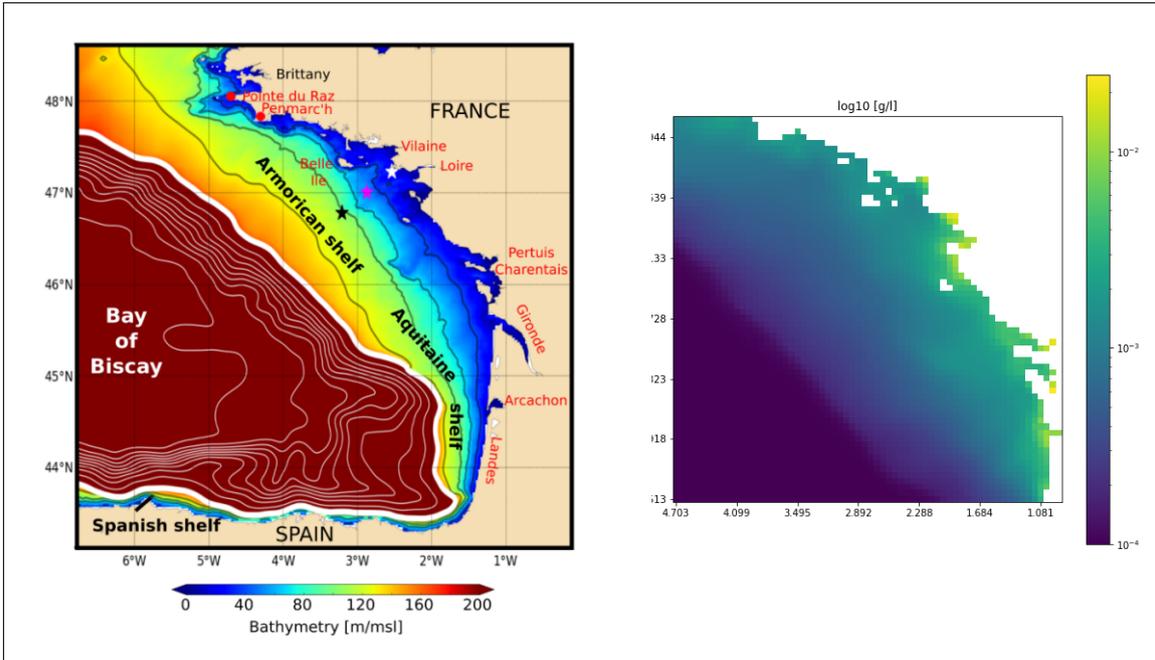


FIGURE 4.1 – (a) Bathymetry of the Bay of Biscay. Black lines represent isobaths 40, 70, 100, and 130 m. The thick white line (corresponding to the 180 m isobath) approximately delimits the shelf edge. (b) Mean spatial distribution of the \log_{10} SSSC (g/L) from the MARS-MUSTANG hydrosedimentary model (from 2007 to 2011) (Mengual, 2016).

These MARS-MUSTANG model results have been validated with in situ and satellite data :

- With in situ data (Mengual et al. (2017), Section 4.1.7) : In situ data were collected at one station of latitude $47^{\circ}15.592'N$ and longitude $2^{\circ}32.972'W$, located near the coast of southern Brittany and close to the city of “Le Croisic”. There, in situ Suspended Sediment Concentration (SSC) were measured from 25 November 2007 to 31 January 2008 with an upward looking 1 MHz Acoustic Wave And Current (AWAC) Nortek profiler put, with a turbidimeter, on a bottom mooring at a depth of 23 m. The SSC has been measured in the whole water column of more than 20 m by the AWAC profiler, calibrated with the turbidimeter, itself calibrated with SSC results obtained through water samples (Mengual et al. (2017), Section 4.1.5). Model results show good agreement with in situ data. Quantitatively, an RMSE of 10.5 mg/L between model and in situ data has been obtained for SSC (from the AWAC profiler) ranging between 10 and 80 mg/L over the whole water column.
- With satellite data ; see Figure 4.2 : The satellite data are derived from the Non Algal Particles (NAP) algorithm from (Gohin, 2011) applied to the MERIS satellite sensor dataset available from 2007 to 2011 and daily sampled. Figure 4.2a,c show that MARS-MUSTANG model fit barely well with the dynamics of the turbidity observed by the satellite, but with a mean intensity in concentration that is half the mean of satellite concentrations observed through its NAP algorithm.

In this study, the overall sea surface field dataset extracted from the MARS-MUSTANG model is a time series of 1430 daily images spanning from 1 January 2007 to 8 December 2010, with a 2.5 km spatial resolution over a 64×64 pixel domain. The case study region was selected to encompass proximal and distal dynamics, including fluvial sedimentary inputs.

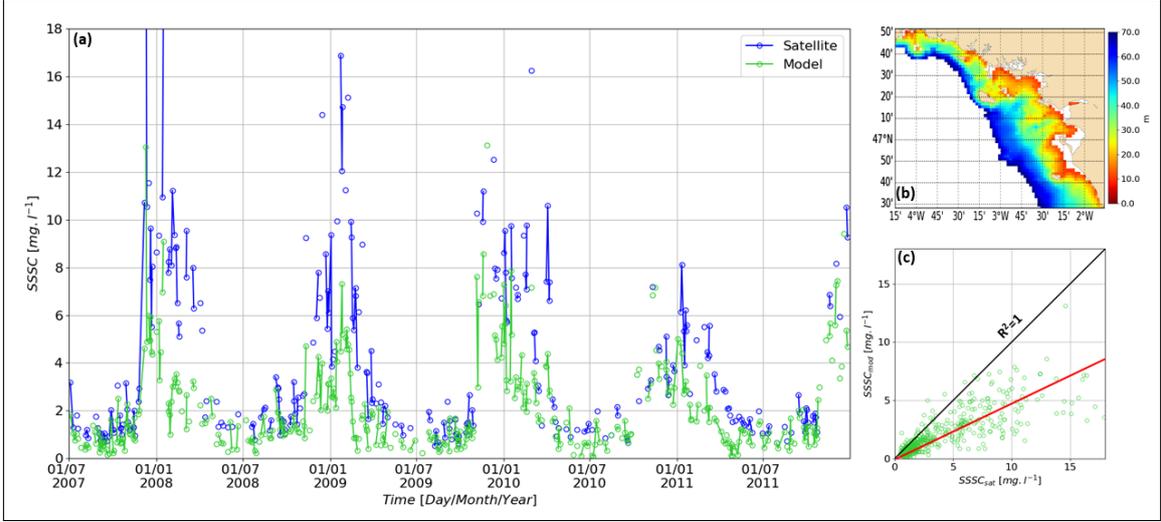


FIGURE 4.2 – Comparison of daily satellite SSSC (Gohin, 2011) ($SSSC_{sat}$) with model results ($SSSC_{mod}$). (a) SSSC time series in mg/L (constrained by the daily frequency of satellite observations) along the 2007–2011 period, averaged over the 10–70 m bathymetric range of the area of interest plotted in (b). Time series on (a) are masked when the cloud cover is higher than 90% over the area of interest. (c) Correlations between modeled and observed SSSC, where continuous and red line refers to model underestimations (with respect to observations) by a factor of 2.

4.1.5 Osse and Benchmarking Framework

As illustrated in Figure 4.3a, ocean color satellite observations of the sea surface are scarce because sensors operate in the visible range and cannot observe the sea surface under cloudy conditions. This results in a high rate of missing data, having a typical mean coverage below 20% in our area of study. This missing data rate makes the interpolation task particularly challenging. It also makes complex the direct assessment of interpolation methods from satellite data. While, for moderate missing data rates (typically below 50%), one may perform benchmarking experiments from real satellite-derived datasets (e.g., Barth et al. (2020a)), Observing System Simulation Experiments (OSSE) (Hoffman and Atlas, 2016) provide a well-posed framework to carry out such benchmarking experiments when dealing with high missing data rates, typically above 80%. This explains why OSSE schemes are widely exploited for benchmarking experiments for the reconstruction of sea surface fields (Halliwell et al., 2017; Leidner et al., 2018) from observation data. Especially, within an OSSE setting, the definition of the evaluation metrics do not depend on the sampling patterns of the observation data, which result in better characterization of space-time scales the interpolation methods can resolve.

The OSSE setting first relies on the availability of a reference gap-free dataset. The latter provides ground-truth states for validation purposes. Here, we use MARS-MUSTANG simulation data as the reference SSSC dataset. With realistic satellite-derived observation data, we generate irregularly-sampled SSC fields by applying to the reference SSSC data-

set cloud masks taken from a time series of real MODIS images. We also add a Gaussian noise to the remaining SSSC values in order to simulate a satellite instrumental noise. As illustrated in Figure 4.3b dedicated to our case-study region, the simulated ocean color images depict missing data rates comprised between 80% and 100% of the total coverage.

As required by learning-based schemes, the OSSE dataset has been split into a training dataset and a validation dataset. The latter dataset encompasses a 100-day period spanning from 2010/08/30 to 2010/12/08. The former dataset is used for the training period that encompasses 1336 days spanning from 2007/01/01 to 2010/08/30. Since SSSC only positive values (given in mg/L) and show an asymmetric statistical distribution (broadly lognormal), all SSSC values are transformed according to a logarithm function in a preprocessing step. This can be regarded as a “pre-normalization” step prior to the application of the usual data normalization step required by learning-based techniques. During this normalization step, all SSSC values below 0.1 mg/L are set to this limit of 0.1 mg/L with the assumption that ocean color satellite sensors are not able to observe below this sensitivity threshold (Morel and Bélanger, 2006).

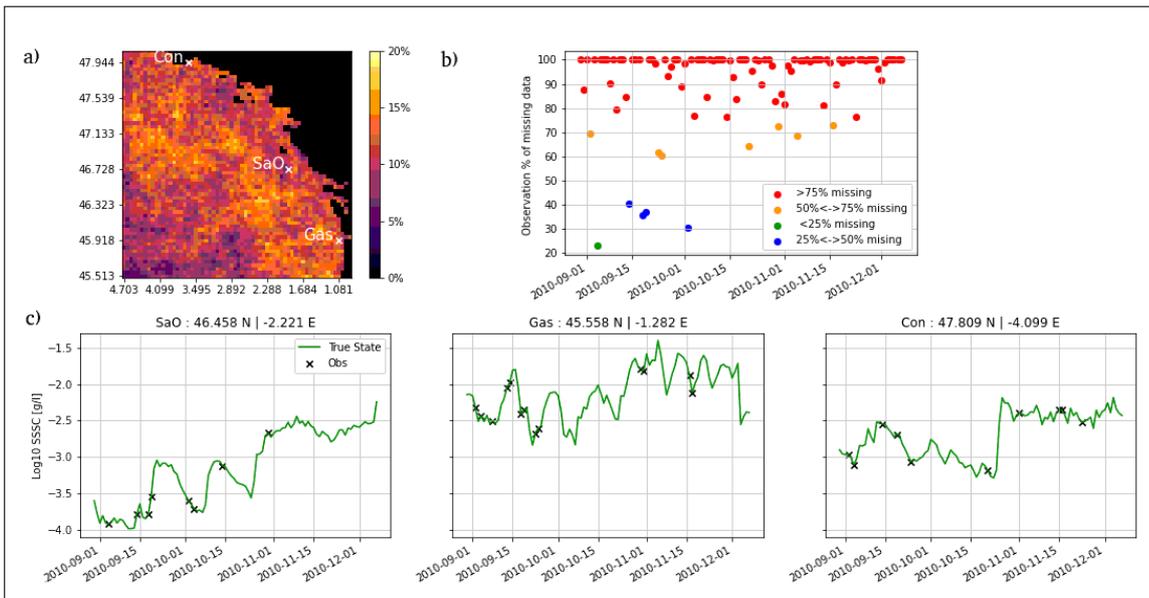


FIGURE 4.3 – Illustration of key features of the considered OSSE dataset : (a) Map of pixel-wise available data rates for the simulated SSSC dataset, with, depicted in white, the location of the three reference stations named ‘SaO’, ‘Gas’, and ‘Con’. (b) Time series of the missing data rate for the simulated SSSC dataset. (c) Time series of the reference SSSC dataset (in green) for the three reference stations, and where black crosses are drawn when the pixel corresponding to each station is observed by the satellite.

4.1.6 Methods

This section presents the different interpolation methods we benchmark in this study. Besides Optimal Interpolation (OI), we investigate state-of-the-art data-driven techniques,

namely EOF-based interpolation (DinEOF), analog data assimilation (AnDA), and neural-network interpolation schemes based on a variational formulation (4DVarNet).

4.1.6.1 Optimal Interpolation

The Optimal Interpolation (OI), also referred to as kriging (Cressie and Wikle, 2011), is a method widely applied in geophysics. Numerous operational satellite-derived products in earth science rely on OI (Høyer and She, 2007). We provide a brief description of OI and refer the reader to Daley (1997) for a detailed review. OI is stated as a minimum variance estimator in linear inverse problems (Oliver and Webster, 2007). Knowing a set of observations y , OI computes an interpolated state x through a weighted linear mapping :

$$x = x^b + K[y - Hx^b], \quad (4.1)$$

where x^b is the background information, and H a transformation matrix from the state space to the observation space. Matrix K , referred to as the Kalman gain, is given by

$$K = P^b H^T (HBH^t + R)^{-1}, \quad (4.2)$$

with B the prior covariance matrix of x ; and R the covariance matrix of the observation errors. R is here assumed diagonal, which relates to an additive Gaussian noise. Besides the interpolated field estimate x , one may also evaluate the estimation uncertainty through posterior covariance P given by

$$P = P^b - KHP^b, \quad (4.3)$$

with P^b as the background error covariance matrix estimated from the numerical model states.

In our experiments, we implement an OI with a Gaussian covariance model whose scale parameter was tuned through cross-validation experiments.

4.1.6.2 DINEOF

DINEOF (Data Interpolating Empirical Orthogonal Functions) is an EOF-based technique for the reconstruction of gap-free fields from irregularly-sampled observations. It exploits the spatial and/or spatio-temporal consistency of the data to deduce a solution to the missing locations (Beckers and Rixen, 2003). DINEOF iterates a projection-reconstruction step using the EOF basis, while observed variables (only non-missing data) are kept unchanged after each iteration. We may emphasize that DINEOF may be regarded as a specific parameterization of the considered neural network schemes using an EOF decomposition as prior in the underlying variational formulation.

The implementation of DINEOF first requires selecting the number of EOF modes used for the reconstruction (Alvera-Azcárate et al., 2015) with cross-validation convergence calculation using RMSE. In our experiments, we typically consider EOF modes accounting for 99% of the total variance of the considered dataset.²

4.1.6.3 AnDA

The Analog Data Assimilation (AnDA) combines an analog forecasting model to an ensemble Kalman smoother to address the data-driven space-time interpolation of spatio-temporal dynamics. A detailed description and evaluation of AnDA can be found in Lguensat et al. (2017). Formally, AnDA involves a linear state-space formulation

$$x_t = A_{x_{t-1}}(x_{t-1}) + \mu_t, \quad (4.4)$$

$$y_t = H(x_t) + \epsilon_t, \quad (4.5)$$

where the linear operator $A_{x_{t-1}}$ derives from the linear approximation of the one-step-ahead mapping between analogs to state x_{t-1} and their successors for some referenced dataset of pairs of two successive states, referred to as a catalog. Analogues typically refer to nearest-neighbors according to some predefined similarity measure. Regarding the parameterization of the ensemble Kalman smoother, spherical covariance priors are considered for noise process μ and ϵ , and the size of the ensembles is typically set to 1000.

4.1.6.4 4DVarNet

Deep learning schemes have rapidly become the state-of-the-art approaches for a wide range of pattern recognition and image processing applications, including in geoscience (Zhang et al., 2016). This also includes neural network approaches dedicated to interpolation issues. Recent studies (Beauchamp et al., 2020; Fablet et al., 2021a) have stressed the relevance of end-to-end 4DVarNet architectures to address space-time interpolation issues with large missing data rates. Especially, these studies show that 4DVarNet method significantly outperform zero filling strategy (eg. based on convolutional architectures) which are classically implemented for interpolation problems (Fablet et al., 2021b). Applied to different case-studies, including ocean remote sensing data (Beauchamp et al., 2020; Fablet et al., 2021a), they result in about 10% improvement in performance over OI, DinEOF and AnDA. To our knowledge, no prior work has investigated their application to SSC interpolation. We provide below a short introduction to 4DVarNet schemes. We refer the reader to Fablet et al. (2021b) for a detailed presentation.

2. DinEOF used in this chapter refer to a simplified version of the method described in 3.1.3, and will result in noise being included in the reconstruction. The number of EOF modes should be determined by cross-validation.

These 4DVarNet architectures rely on the formulation of the interpolation problem as the following minimization issue

$$\hat{x} = \arg \min_x \|x - \Phi(x)\|^2 \quad \text{subject to } y = H \cdot x, \quad (4.6)$$

where H maps gap-free state x to the observation y , and Φ can be regarded as a projection operator. The latter states a prior on the interpolated states. For a given operator Φ , the design of a neural network architecture, which implements this algorithm, leads to an end-to-end architecture, which uses an irregularly-sampled observation as inputs, and aims at retrieving a gap-free field as outputs. This end-to-end architecture embeds an iterative solver of the above minimization problem. For instance, one may consider a fixed-point iterative algorithm similar to the one implemented by DINEOF procedure (see Section 4.1.6.2). Interestingly, this fixed-point solver is parameter-free, which results in a lighter learning-based architecture and motivates the choice considered here. Regarding operator Φ , we follow Beauchamp et al. (2020); Fablet et al. (2021a) and explore two configurations which result in the two 4DVarNet architectures we consider in our experiments, namely :

- AE-4DVarNet : this architecture exploits a convolutional auto-encoder (AE) architecture for operator Φ . The AE first encodes the input field x into a low-dimensional feature vector and then applies a decoder to map this feature vector to a reconstructed field $\Phi(x)$. The detailed specification of the AE architecture for operator Φ is provided in Appendix 4.1.12.1.
- GE-4DVarNet : this architecture exploits a two-scale U-net-like architecture for operator Φ according to Fablet et al. (2021a). Contrary to the AE-based setting, it does not involve a dimension reduction step. The resulting energy $\|x - \Phi(x)\|^2$ may be interpreted in terms of Markovian prior as detailed in Fablet et al. (2021a). The detailed specification of the considered U-Net-like architecture Φ is reported in Appendix 4.1.12.2.

The considered 4DVarNet architectures are implemented using Keras framework (Original code can be found on Github : Available online : https://github.com/CIA-Oceanix/DINAE_keras, accessed on 2021/09/01). The SSSC implementation is available on Github : Available online : https://github.com/Jvient/OSSE_BoB-4DVarNet, accessed on 2021/09/01). As training loss, we use a custom loss function which compute a weighted sum of Mean Absolute Errors for the SSC images and their spatial gradients. The training set-up involves Adam optimizer with a batch size of 16. We gradually increase the number of fixed-point iterations of the 4DVarNet architectures from 1 to 40 every 14 epochs.

4.1.6.5 GE-4DVarNet

A two-scale U-net-like architecture is proposed for operator Φ according to Fablet et al. (2021a). The latter can be regarded as a parameterization of a Gibbs energy prior. An end-to-end learning formulation were introduced (end-to end-2019) which combine a signal \mathbf{X} and an observation factor \mathbf{Y} . The resulting end-to-end architecture is referred to as GE-4DVarNet. The observation is characterized by having only a portion of the domain observation available, irregularly sampled. In this study the energy based representation U_θ :

$$U_\theta(X) = \|X - D(E(X))\|^2 \quad (4.7)$$

Where E and D are, respectively, the encoder and the decoder of the NN, θ the parameters of U . The formulation applied to a Bayesian energy-based framework can be formulate as :

$$X_{target} = argmin U_\theta(X) \quad (4.8)$$

Considering \mathbf{Y} as the irregularly observations defined on a subdomain Ω and that U_θ is the energy representation of all \mathbf{X} , it is possible to define an operator O :

$$O = argmin \sum_i^N \|Y_i - O(U_\theta, Y_i, \Omega_i)\|^2 \quad (4.9)$$

Which result in a minimization reconstruction error for the whole observed data time series dependant of O , itself dependant of U_θ . A detailed specification for the operator Φ is provided in Appendix 4.1.12.2.

4.1.7 Results

4.1.7.1 Metrics and Evaluation

The different interpolation methods are evaluated according to two standard metrics : the global root mean square error (RMSE) and a global reconstruction score (R-score), in terms of rate of variance of the true data captured by the interpolation. The two metrics give an general overview of the performance of a given interpolation method. Besides these global metrics, we report an evaluation for the three reference stations depicted in Figure 4.3a. The first location, referred to as ‘Con’, is in the northernmost zone of the case-study area close to the coastal city of Concarneau. It presents fairly high concentrations over the entire series superimposed with oscillations at a frequency of around 15 days, which likely relate to M2-tidal wave aliasing period (when observed only once a day at fixed clock hour by a satellite). The second station is located near the coastal city of Les

Error	Unit	Data Domain	OI	DinEOF	AnDA	AE-4DVarNet	GE-4DVarNet
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	All	0.176	0.167	0.162	0.142	0.104
R-score	%	All	90.4	91.3	91.9	93.7	96.6
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	Observed	0.056	0.038	0.049	0.095	0.094
R-score	%	Observed	98.5	99.4	99.3	92.8	96.4
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	Unobserved	0.187	0.177	0.171	0.151	0.106
R-score	%	Unobserved	89.5	90.5	91.2	93.2	96.6

TABLE 4.1 – RMSE and R-score computed for all methods over the SSSC validation period : these scores are computed globally (All) and over the observed data (Observed) and the missing data (Unobserved) patterns.

Sables D’Olonnes (SaO) and has a steadily increasing concentration over the entire time series with oscillation at a frequency lower than Con (28 days). The last station (Gas) has been chosen near the estuary of the Gironde river. It shows a relatively flat time series, except from 4th March to 12th March, where it presents an increase in SSC, followed by a new flat series. The SSSC increase is due to a fluvial contribution from the continent observed at the end of the winter 4.6.

4.1.7.2 Global Performance

In Table 4.1, we report the global evaluation metrics of the benchmarked methods. Mean RMSE and R-score values are computed for the test dataset over the entire domain. OI performs the worst of all tested methods. However, the improvement using DINEOF and AnDA is relatively marginal, with an RMSE of 0.19 for OI versus 0.18 for DINEOF and 0.17 for AnDA over the missing data patterns. A greater improvement appears for the two neural network schemes, with a relative gain of 20% and 40% for AE-4DVarNet and GE-4DVarNet, respectively. GE-4DVarNet clearly outperforms all the other methods. Interestingly, it results in similar reconstruction performance over the observed and unobserved areas close to 96% of Explained Variance (EV), which supports a greater generalization properties of the underlying representation of the SSSC dynamics through learnt GE operator Φ . This results in an interpolation performance which is less sensitive to the rate of missing data, even for periods with high SSSC variations.

In Figure 4.4, interpolation scores are analyzed in function of high cloud cover periods. The time series of the daily RMSE is depicted, along with time periods where less than 5% of observations are available (red bands). The missing data rate is larger in the second part of the reconstruction period due to the gradual transition to winter with a higher cloud cover. In winter, turbidity increases with the impact of higher winds and waves, along with the sedimentary input from the continent following rainfall. The connection between the change of dynamical regime and a lack of data is a likely cause of the RMSE peaks visible on mid-October. As mentioned before, the performance of the 4DVarNet methods, and particularly GE-4DVarNet, is less affected by the cloud cover rate than other methods are, because RMSE keep relatively low values during those cloudy periods.

The highest RMSE observed for OI and DinEOF is associated with a river plume (“Le Moros and Saint Laurent river”) containing continental inputs located in the “Baie de la Forêt” near Concarneau, that is not correctly retrieved. The underestimation of SSSC by OI is also observed for DINEOF, which may be explained by the initialization of DINEOF algorithm with the OI solution (cf. 4.1.6). We may point out that GE-4DVarNet also relies on the same initialization but shows a much greater ability to recover the global space-time features of the SSSC fields.

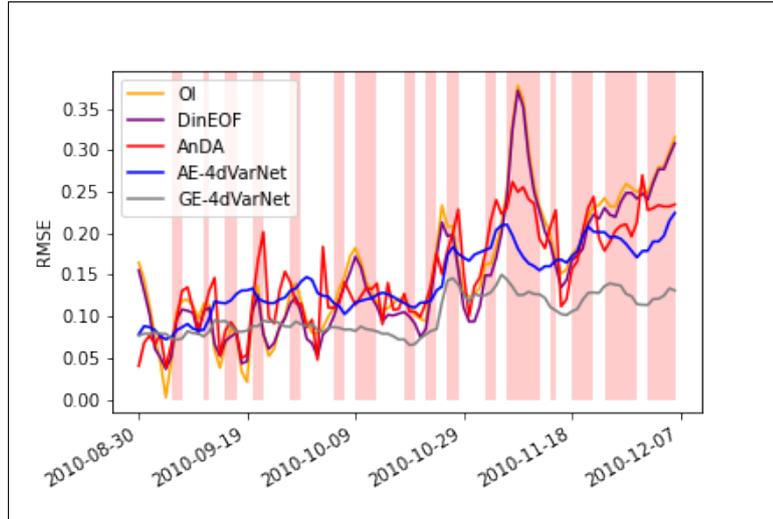


FIGURE 4.4 – Daily reconstruction RMSE for OI, DinEOF, AnDA, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet. Red bars indicate time periods having a daily missing data rate above 95%. Our simplified DinEOF method shows similar results as OI see section 4.1.6

In Figure 4.5, we further illustrate the reconstruction of the benchmarked schemes for the norm of the gradient of the SSSC fields. This provides another way to assess the ability of the different methods to retrieve the frontal structures in SSSC fields. Figure 4.5a further stresses, on the mean gradient field for the whole series, the better performance of GE-4DVarNet, which shows globally the lowest gradient map errors, compared to the other approaches. This is also confirmed quantitatively by the map of the time-averaged RMSE map shown in Figure 4.5b, and global RMSE statistics are given in Table 4.2. More specifically, these gradient norm fields depict a clearly visible contour between coastal and open seas. This contour broadly follows the 100 m isobath which borders a well-known large mud field named the “Grande Vasière”. This mud field impacts the sediment dynamics in the whole Bay of Biscay (Mengual, 2016). This further suggests the underlying GE representation learnt by GE-4DVarNet model for SSSC dynamics to be much more relevant than a AE-based representation in AE-4DVarNet to encode SSSC dynamics. We also interpret the lower performance retrieved by DINEOF and AnDA to be caused by a spatial smoothing effect associated with the EOF-based decomposition of the spatial variability (both are initialised with the OI output which is spatially smooth). EOF decomposition is by construction less adapted to the retrieval of fine-scale gradient

patterns.

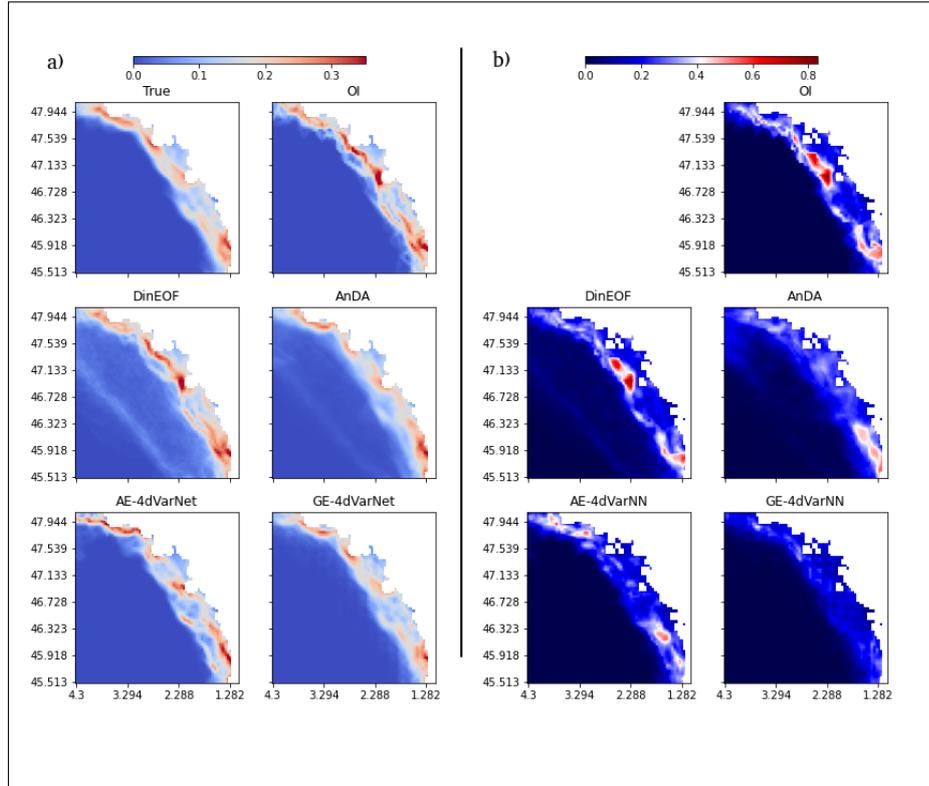


FIGURE 4.5 – Reconstruction of SSSC gradient fields : (a) reconstruction obtained by OI, AnDA, DINEOF, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet on average for the whole 100-day validation period. (b) map of the mean reconstruction error for the 100-day validation period for OI, DinEOF, AnDA, AEP-4DVarNet, and GE-4DVarNet. The shelf effect in the open sea visible in the DinEOF and AnDA results comes from the 0.1mg/l threshold described in Section 4.1.4.1

Global	Unit	OI	DinEOF	AnDA	AE-4DVarNet	GE-4DVarNet
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]/\text{m}$	0.110	0.093	0.079	0.084	0.07
R-score	%	16.0	40.6	57.1	51.1	63.7

TABLE 4.2 – Mean RMSE and R-score for the norm of the SSSC gradients computed for all methods over the 100-day validation period.

4.1.8 Reconstruction of Time Patterns

Besides the reconstruction of spatial patterns, we also investigate whether the interpolated fields provide a relevant characterization of the variations of SSSC versus time. In Figure 4.6, we compare the time series of the true SSSC the interpolated time series for the three selected stations, namely SaO, Gas, Con as defined in Figure 4.3. GE-4DVarNet reaches the greatest correlation with respect to the groundtruth. This is confirmed by the visual inspection of the different series. For instance, the GE-4DVarNet reconstruction fits very well the true series at ‘Con’ station for abrupt change occurring on 2010/10/20. By

contrast, the other schemes seem to produce time frequency artifacts, which may relate to some erroneous reconstruction of spatial gradients as discussed above. Interestingly, GE-4DVarNet also recovers the 14-day oscillation related to the M2 tide process even with a high missing data rate. This may relate to spectral features captured by the GE representation of sediment dynamics learnt by GE-4dVarNet.

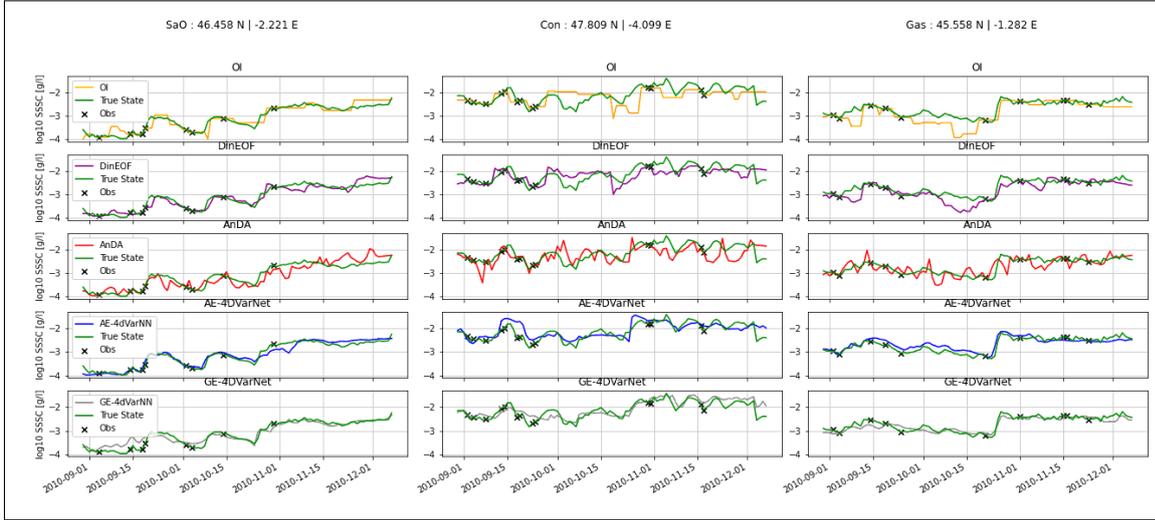


FIGURE 4.6 – Time series of the SSSC reconstruction for OI, DinEOF, AnDA, AE-4DVarNet, and GE-4DVarNet. Green series refer to true state, mark to the observational term inputs. Locations refer to 4.1.8

4.1.9 Discussion

The goal of this study has been to assess the performance of interpolation methods for the retrieval of gap-free series of SSC fields from irregularly-sampled satellite-derived measurements. Given the typical cloud cover for mid-latitude areas (about 80% of missing data in our case-study), we implemented an OSSE framework to evaluate the potential of data-driven approaches, which have recently emerged as relevant alternatives to model-driven assimilation products (Barth et al., 2020a; Ouala et al., 2018; Renosh et al., 2017) and operational OI schemes (Lorenzo et al., 2017; Tomas-Burguera et al., 2018). Interestingly, our study stresses that the selection of the interpolation methods may strongly affect the ability to retrieve some features of SSSC dynamics. For instance, the best scheme (GE-4DVarNet) results in a relative gain with respect to OI in terms of RMSE greater than 40%. We believe that this OSSE could provide a relevant benchmark for future development of SSSC interpolation methods. We make available online our dataset and the associated evaluation framework Available online : https://github.com/Jvient/OSSE_BoB-4DVarNet, accessed on 2021/09/01 .).

Among the three classes of data-driven interpolation schemes, the neural network approaches led to improvement with respect to the OI baseline. Both DinEOF and AnDA rely on an EOF decomposition for the spatial variability of SSS dynamics. Their interpo-

lation results suffer from limitations in retrieving frontal structures. As the missing data rates are greater than 80%, the EOF decomposition may not be appropriate to appropriately capture relevant space-time scales of SSSC dynamics from the observed data.

Overall, our study clearly advocates for the design and development of neural network schemes for the interpolation of SSSC fields. For GE-4DVarNet scheme, we reported a mean relative gain with respect to OI in terms of RMSE is of 41% for the $\log_{10}(\text{SSSC})$ values and of 35% for their gradient norm. Besides, these global performance metrics, we also showed that the resulting interpolations may capture relevant spatial patterns (e.g., the impact of a well-known mud field zone in the case-study area) and time scales (e.g., M2-tide forcings exhibited at station Con), which were not retrieved using the other approaches. These results are in line with other studies dedicated to other sea surface geophysical parameters, namely sea surface temperature (SST) (Barth et al., 2020a; Fablet et al., 2021a) and sea surface height (SSH) (Fablet et al., 2021a). These studies also highlighted the greater ability of neural network approaches based on a variational formulation to learn relevant interpolation algorithms when dealing with large missing data rates : typically from 50% to 75% for SST and below 10% for SSH. Interestingly, 4DVarNet schemes also relate to variational data assimilation models. This may be of interest to exploit some model-driven priors onto the considered geophysical dynamics when available (Fablet et al., 2021a).

These results show that NN-based methods outperform the interpolation rate of this OSSE. The common main reasons for this is that these methods exploit much more past observations for the present reconstruction. Indeed, when applying an OI in a multi-map context with a total absence of data, it is necessary to extend the spatial influence of the Gaussian kernel and obtain a covariance matrix that can provide results (Zhen et al., 2020). This extension of the neighborhood search to observations implies a more important smoothing of the map during the completed interpolation. Concerning the EOF-based methods (DinEOF and AnDA) the main source of errors came from the noise allocated to the simulated observations. However this could be avoided while applying proper cross-validation steps as shown in (Alvera-Azcárate et al., 2015). Here, these bad patterns are assimilated in the same way as real high frequency events. Thus, when reconstructing the images, and, despite the fact that 95% of the explained variance has been selected, the result leads to a worse reconstruction, especially in the higher dynamic range.

All the considered data-driven approaches rely on the availability of a reference gap-free dataset during the training phase. This is particularly important for neural network approaches. The applicability of the trained models to real satellite-derived datasets particularly depends on ability of numerical simulations to represent the targeted SSSC dynamics. Numerical simulations cannot in general address all the processes involved in real observation data. For instance, the MARS-MUSTANG model used here does not simulate the fate of detritic particles that appear in real satellite observations of SSSC

fields. We may also point out that the additive Gaussian instrumental noise is likely not an accurate representation of real satellite sensor errors. We then regard the reported interpolation performance as a lower-bound of the performance that could be retrieved for real observation datasets. Future work shall further explore the application and adaption of the proposed schemes to real satellite datasets. Regarding 4DVarNet approaches, we can envision different learning strategies. We may first explore a full training from scratch of the proposed scheme. In our study, we used a 3-year gap-free datasets for training. For real satellite data, we may exploit a 20-year time series. With a mean cloud coverage of 85% over our area of study (cf. Figure 4.3), the number of data available for the learning process is roughly equivalent to a 3-year gap-free dataset. This makes the training of 4DvarNet models from real observation dataset a realistic option to be explored. Transfer learning strategies (Orenstein and Beijbom, 2017; Weiss et al., 2016), which would exploit pre-trained models using the proposed OSSE before adapting them to real observation datasets, also appear as a promising direction. These strategies shall require smaller real datasets compared with training models from scratch.

The application to real observation datasets could also benefit from several extensions of the considered 4DVarNet schemes. First of all, such schemes could easily embed covariates to further constrain the interpolation process, including among others the bathymetry or metocean covariates. We believe that these schemes may also open new avenues for short-term forecasting issues from gappy satellite observation data (Fablet et al., 2021b), as forecasting issues may be regarded as an interpolation problem in which the future is masked. Future work shall also investigate the estimation of some uncertainty of the interpolation. Different studies (Barth et al., 2008; Sidén and Lindsten, 2020) provide methodological backgrounds to embed such an uncertainty component in 4DVarNet schemes.

4.1.10 Conclusions

In this study, we have addressed the data-driven interpolation of satellite-derived SSSC fields. An OSSE setting in Bay of Biscay has shown that data-driven schemes, especially neural-network architectures backed by a variational formulation for space-time interpolation, can significantly improve the reconstruction of SSSC dynamics compared with an OI, which is classically used in deriving operational products. Our experiments support a greater performance of GE-4DVarNet scheme both to recover spatial and temporal patterns with a relative gain up to 40% in terms of RMSE w.r.t. the groundtruth. These results are in line with recent experiments using other satellite-derived sea surface parameters, such as sea surface height (Beauchamp et al., 2020) and sea surface temperature (Barth et al., 2020a; Fablet et al., 2023).

With possible applications not only for interpolation but also for forecasting or model

identification, the 4DVarNet methods may open new research avenues for the modeling, reconstruction, and forecasting of sediment dynamics from partial satellite-derived observations with direct operational impacts on the short-term forecasts.

4.1.11 Materials

All code and samples are available here : Available online : https://github.com/Jvient/OSSE_BoB-4DVarNet (accessed on 2021/09/01). Data are available in the code package available in Github link : https://github.com/Jvient/OSSE_BoB-4DVarNet accessed on 2021/09/01

4.1.12 Appendix

4.1.12.1 Architecture of the Autoencoder Operator ϕ (AE-NN)

A convolutional AutoEncoder formulation based on encoding (E) and decoding (D) operator. First, E reduces the dimension of the domain to a lower dimensional space. Its architecture is based on 5 Conv2D layers. We first consider a convolutional auto-encoder as proposed in Barth et al. (2020a); Fablet et al. (2023) as follows. The encoder, which maps the input data to a low-dimensional space, involves the following five-layer CNN :

- Conv2D (Relu activation, 30 filters, 3×3 kernels, average pooling layer) ;
- Conv2D (Relu activation, 60 filters, 3×3 kernels, average pooling layer) ;
- Conv2D (Relu activation, 120 filters, 3×3 kernels, average pooling layer) ;
- Conv2D (Relu activation, 240 filters, 6×6 kernels, average pooling layer) ;
- Conv2D (Linear activation, 30 filters, 3×3 kernels).

D project the low dimensional encoding representation into the original space. Its architecture is composed of Conv2Dtranspose layer and Conv2D layer. The resulting encoding space is a $2 \times 2 \times 30$ space. Regarding the decoder, we consider a classic convolutional architecture using Conv2Dtranspose upsampling layers :

- Conv2DTranspose (Relu activation, 256 filters, 8×8 kernels) ;
- Conv2DTranspose (Relu activation, 128 filters, 3×3 kernels) ;
- Conv2DTranspose (Relu activation, 64 filters, 3×3 kernels) ;
- Conv2DTranspose (Relu activation, 20 filters, 3×3 kernels) ;
- Conv2D (Relu activation, 40 filters, 3×3 kernels, average pooling layer) ;
- Conv2D (Linear activation, 64 filters, 3×3 kernels).

Overall, this ConvAE model involves 500k parameters.

4.1.12.2 Architecture of the Gibbs-Energy Operator ϕ (GE-NN)

The NN is based on two NN energy. A parameterization of operator Φ which relates to Markov random fields (Barth et al., 2008; Fablet et al., 2023) has also been explored. It

does not rely on dimension reduction hypothesis as the previous one. A good state-space reconstruction refers to a low-energy state, where at any space position s and time step t , $\Phi(x)(s,t)$ only involves state x in a space-time neighborhood of (s,t) . The following architecture is used :

- AveragePolinglayer (4×4);
- Conv2D (Relu activation, 40 filters , 3×3 kernels) with a null-weight constraint for the center of the convolution window ;
- Conv2D (Relu activation, 40 filters, 1×1 kernels);
- a residual network (Li and Allen-Zhu, 2019) with the following residual block :
 Conv2D (Relu activation, 240 filters, $200 \times 200 \times (5 \times 40)$ kernels, average pooling layer) ;
 Conv2D (Relu activation, 40 filters, 1×1 kernel) ;
- Upsampling to the original input shape is processed by a Conv2DTranspose (Linear activation, 4×4 kernels).

This GE-4DVarNet model involves 80k parameters, which is much more compact than the AE-4DVarNet architecture.

RÉSULTATS SUR LA RECONSTRUCTION DE DONNÉES SPATIALISÉES SATELLITES (OSE)

Ce chapitre de résultats est présenté sous la forme d'un article publié dans la *special Issue AI for Marine, Ocean and Climate Change Monitoring* de la revue *Remote Sensing*¹ en juillet 2022. Cet article traite de la comparaison de méthodes d'interpolation (dont 4DVarNet) sur des données d'observation réelles fournies par le capteur satellitaire MODIS au dessus du Golfe de Gascogne. Plusieurs méthodes sont évaluées directement sur ces observations satellites "réelles", dans des expériences ainsi qualifiées de OSE (Observing System Experiment) par opposition aux expériences sur données simulées qualifiées de OSSE du chapitre précédent. Une partie des résultats et de la discussion est consacrée à la comparaison des résultats d'interpolation en OSSE et OSE.

5.1 Résumé

La caractérisation de la dynamique des sédiments en suspension dans l'océan côtier fournit des informations essentielles pour les études scientifiques et les défis opérationnels concernant, entre autres, la turbidité, la transparence de l'eau et le développement de micro-organismes utilisant la photosynthèse, qui est critique pour la production primaire. En raison de l'interaction complexe entre les forçages naturels et anthropiques, la compréhension et la surveillance de la dynamique des sédiments en suspension restent très difficiles. Les modèles numériques ne sont toujours pas capables de rendre compte de la variabilité décrite par les ensembles de données in situ et satellitaires. Grâce à la disponibilité croissante de données d'observation, les schémas basés sur les données (*data-driven learning schemes*) sont naturellement devenus des approches pertinentes pour compléter les approches basées modèle (*model-driven learning schemes*). Des travaux antérieurs ont souligné ce potentiel dans le cadre d'une expérience de simulation de système d'observation (OSSE). Ici, nous poussons plus loin l'application à l'interpolation de champs de concentration de sédiments de surface de la mer à partir d'ensembles de données d'ob-

1. <https://www.mdpi.com/2072-4292/14/16/4024>

servations réelles dérivées d’observations satellites incomplètes. Nous démontrons que les architectures d’apprentissage profond de bout en bout, à savoir 4DVarNet, qui s’appuie sur une formulation d’assimilation de données variationnelle, arrive à palier avec succès la phase d’apprentissage sans pouvoir s’appuyer sur des données de références sans lacunes, mais uniquement sur les données disponibles. 4DVarNet surpasse de manière significative les autres stratégies de reconstruction tels que l’interpolation optimale et DINEOF avec un gain relatif supérieur à 20% en termes de RMSLE et améliore la résolution spatiale haute des motifs dans le processus de reconstruction. Il est intéressant de noter que 4DVarNet présente également la meilleure concordance entre les performances d’interpolation évaluées pour un OSSE et pour des données réelles. Ce résultat souligne la pertinence des paramètres de l’OSSE pour les futures phases de développement d’applications aux ensembles de données réelles.

5.2 Abstract

The characterization of suspended sediment dynamics in the coastal ocean provides key information for both scientific studies and operational challenges regarding among other turbidity, water transparency and the development of micro-organisms using photosynthesis, which is critical to the primary production. Due to the complex interplay between natural and anthropogenic forcings, the understanding and monitoring of the dynamics of suspended sediments remains highly challenging. Numerical models still lack capabilities to account for the variability depicted by in situ and satellite-derived datasets. Through the ever-increasing availability of both in situ and satellite-derived observation data, data-driven schemes have naturally become relevant approaches to complement model-driven ones. Our previous work has stressed this potential within an observing system simulation experiment. Here, we further explore their application to the interpolation of sea surface sediment concentration fields from real gappy satellite-derived observation datasets. We demonstrate that end-to-end deep learning schemes, namely 4DVarNet, which relies on variational data assimilation formulation, applies to the considered real dataset where the training phase cannot rely on gap-free references but only on the available gappy data. Compared to data-driven schemes such as optimal interpolation and DINEOF, 4DVarNet improves the reconstruction of fields and their spatial gradients by a relative gain greater than 20% in terms of RMSLE and R-scores. Interestingly, 4DVarNet also shows the better agreement between the interpolation performance assessed for an OSSE and for real data. This result emphasizes the relevance of OSSE settings for future development calibration phases before the applications to real datasets.

5.3 Introduction

Marine Sediment fluxes result from a combination of natural and anthropogenic forcing factors (Irabien et al., 2020; Owens, 2020). The main source of sediment load comes from land, and the resuspension of sediments occurs under the effect of waves, tides and the general oceanic circulation, but also from fish trawling and maritime development, such as harbor sediment dredging and dumping, aggregate extraction, submarine cable installation, offshore wind farms exploitation, oil and gas activities, etc (Borja et al., 2010). Besides these latter anthropogenic stresses, additional ones are expected in the foreseeable future through climate change, involving sea-level and waves rise, modifying the remobilization and transport in the coastal zone and the sediment inputs from the continent by the modification in the drainage basins hydraulic regime due to modified rainfall (Elliott et al., 2015).

Tracking suspended particles in shelf seas is of interest for coastal management and marine ecosystems monitoring. Yet, the assessment of sediment fluxes, especially near the bottom of the ocean, is a key issue in the investigation of coastal morphological evolution, habitat changes and pollutant dispersion and behaviour (James, 2002; Lacombe and Morrison-Saunders, 2017; Tecchiato et al., 2015). As the turbidity induced by fine sediment suspensions, especially near the surface of the ocean, impacts the primary production by narrowing the thickness of the euphotic zone (Mitchell and Cunningham (2015)), the quantification of the suspended sediment concentrations and fluxes, at the scale of the continental shelf, is also a critical aspect to fulfill the boundary conditions of their fine mesh-grid coastal hydrodynamic models (Saulnier et al., 2021) used for impact studies. However the quantification of suspended sediment fluxes is generally a difficult task due to the complexity of the hydrodynamic and morpho-dynamic processes in play. In absolute terms, assessing the overall sediment dynamics requires understanding of transport processes of mineral particles in the water column as well as their behaviour in the seabed, with resuspension capacities and consolidation within the sediment, oftentimes under the influence of biota, impacting flocculation processes in the water column and the biochemical behaviour in the sediment (Diaz et al., 2020).

In this context, deterministic (physics-based) numerical models are usually computationally intensive and inaccurate when assessing sediment fluxes from their continental source to the shelf edge (Allard et al., 2003; Le Hir et al., 2007; Wang et al., 2013). Data-driven methods have emerged as appealing approaches to benefit the available datasets coming from observations and model simulations (Jin et al., 2021; Moore et al., 2019; Nazeer et al., 2017; Renosh et al., 2017). In particular, recent advances bridge data assimilation formulation and machine learning paradigms (Barth et al., 2020b; Fablet et al., 2021b). These schemes are particularly relevant to address the irregular space-time sampling of satellite-derived sea surface dynamics. Following our previous study within an

OSSE (Observing System Simulation Experiment) setting (Vient et al., 2021), we aim at evaluating whether such learning-based schemes apply to real satellite-derived datasets. Then, in this article, in the same way we designed real data experiments. They are typically called OSE (Observing System Experiment). Our contribution is two-fold : (i) we develop a novel application of 4DVarNet schemes (Fablet et al., 2021b) for satellite-derived sea Surface Suspended Sediment Concentrations (SSSC); (ii) we propose an evaluation framework based on real MODIS satellite image series to benchmark data-driven and learning-based schemes for the reconstruction of satellite-derived SSSC fields. We further assess how OSSE benchmarking experiments based on hydrosedimentary numerical simulations (Mengual et al., 2017) inform performance metrics for real datasets in the OSE experiments.

The remainder is organized as follows. Section 5.4 details the considered datasets. Section 5.5 details the processes defined to interpolate observation data which are the Optimal Interpolation and the new 4DVarNet scheme. Section 5.6 shows the global and specific performance for each method. And finally Section 5.7 compares OSSE and OSE configurations and characterizes the limits of the 4DVarNet interpolator.

5.4 Data

The area of study, presented in the first subsection, is located in the Bay of Biscay. The main geophysical parameter of study is the sea Surface Suspended Sediment Concentration (SSSC), which relates to the sediment dynamics. Two sets of SSSC data were used. We present the datasets considered in this study, namely numerical simulation data (Section 5.4.2) and real satellite-derived MODIS data (Section 5.4.3). These two sets of data have been used to perform two different kinds of experiments carried out in parallel : the simulated data are dedicated to OSSE (Observing System Simulation Experiment) while the real data are dedicated to OSE (Observing System Experiment). Thence, later, Sections 5.6 and 5.7 will compare the results obtained by these two different kinds of experiments.

5.4.1 Area of Interest

The study area encompasses a major part of the northern region of the Bay of Biscay (BoB), located on the west coast of France (North-East Atlantic). In this area the bathymetry extends from the shallow waters of the coast to the great depths of the abyssal plain. The continental shelf is wide (Fig 4.1). The shelf break, dotted with canyons, crosses the area like a transverse line from its north-west corner to the south-east one. The bottom sedimentology of the BoB can be divided into three main seafloor patterns : a large muddy area located in the middle of the shelf and referred to as the "Grande Vasière"

(e.g. Mengual et al. (2019), coastal areas characterized by rocky and sandy seabeds, and the shelf break with a predominance of rocks. The water column experiences a variety of physical forcings and processes : tides, internal waves (especially from the shelf break), trapped waves, density gradients and seasonal winds driven circulation (with winter storms notably), mixing and stratification, eddies, fronts, filaments, upwelling/downwelling and discharges from rivers (Huthnance et al., 2022). Concerning the latter, the Gironde and Loire rivers are the main sources of water and sediment suspended loads (Castaing et al., 1999). Their estuaries are located at the northern latitudes of 45.6° and 47.2° respectively. The particle dynamics in the surface layers of this oceanic area is driven by the hydrodynamics superimposed with biological cycles, which notably are well characterised by phytoplankton blooms appearing along the Armorican shelf break especially in spring.

5.4.2 MARS model simulations (for OSSE)

The simulations dataset comes from a hydro-sedimentary model called MARS-MUSTANG (Mengual et al., 2019). MARS is the hydrodynamic module. MUSTANG is the sedimentary module. MARS computes the general circulation according to meteo forcings from meteo models ARPEGE and WaveWatchIII (atmospheric pressure, wind and waves), and density gradients bring by boundary conditions upon a global hydrodynamical model (CMEMS/GLORYS reanalysis). MUSTANG computes sediment resuspension and settling through erosion and deposition laws followed with advection-dispersion and settling velocity equations, in connection with a dynamic seabed sediment layer model, initiated with a nature of the seabed chart based on in situ measurements (Mengual et al., 2019). The main output of this coupled model is values of suspended sediment concentrations in the whole water column, from its surface to depths. Since MARS-MUSTANG is designed to model the fate of inorganic sediments only, the suspended sediment obtained is of mineral (or inorganic) origin, and should appropriately be termed Suspended Particulate Inorganic Matter (SPIM). In particular, SPIM does not include detrital particles because MARS-MUSTANG is not a biological model of primary production with a detrital compartment. Such information on the nature of particles modelled here is necessary when MARS-MUSTANG results are compared with satellite images that "mixes up" more components : especially SPIM and detritus (see following Section 5.4.3).

Only surface values of suspended sediment concentrations obtained with MARS-MUSTANG will be exploited. In Section 5.6 (Results) these concentrations will be called using the general term SSSC (Surface Suspended Sediment Concentration). For information, these SSSC values were already exploited by our team in order to obtain the present OSSE results in a previous article (Vient et al., 2021). This latter article also gives a condensed information on the validation of the MARS-MUSTANG simulations with the satellite data, which shows a consistent behaviour. In particular, the corresponding configuration

of the model takes into account the discharges from the two main rivers (Gironde and Loire) and also the Vilaine river (which estuary is located slightly north of the Loire one). Fig 4.1b displays the mean SSSC obtained with the model at the ocean surface and well shows that higher SSSC occurs preferably in the vicinity of the coast. This is due to wave exposure and tidal range in combination with the higher inorganic sediment loads. Above the abyssal plain, suspended sediments are nearly absent. The threshold of 0.1 mg/L is well correlated with the isobath of 180 m corresponding to the shelf edge. The Figure exhibits areas where SSSC values are greater than 10 mg/L near estuaries of the main rivers (Gironde, Loire, Vilaine).

The model is configured with a spatial mesh grid resolution of 2.5 km over a wider area than our area of interest, extending from latitude 41°N to 55 °N, and longitude 18°W to 9°30'E (Mengual et al., 2019). Outputs from MARS-MUSTANG were then extracted in our area of interest, for our present OSSE experiments, and lead to images having a size corresponding to a spatial grid of 128x128. In terms of time data frame, the overall sea surface field values extracted from the MARS simulations represent a time series of 1430 daily images spanning from 1 January 2007 to 8 December 2010. The MARS-MUSTANG model and simulations will simply be referred to as MARS hereafter for short.

5.4.3 MODIS real satellite data (for OSE)

Our satellite-derived dataset is based on the MODIS sensor images acquired on board both Aqua and Terra satellites. The MODIS sensor is part of the 1991 NASA-initiated Earth observation system. It aims at monitoring, among others, the ocean dynamics. Here we exploit the Level-2 geophysical variable called Non-Algal Particles (NAP) that is processed using Francis Gohin et al bio-optical algorithm (Gohin et al., 2005) applied to the MODIS normalized remote-sensing reflectances. All clouds, also including cloud shadows, in raw satellite images were flagged with a low detection threshold so as to remove all questionable signals. Also, atmospheric over-corrections are taken into account using the reflectance at 412 nm (Gohin et al., 2005). Their algorithm was specifically calibrated for the Bay of Biscay using dedicated in situ measurements from 20 field cruises that took place over the shelf, and which represent a total amount of about 1000 in situ data points (see Table 1 and Figure 2 in Gohin et al. (2005)). The NAP concentration (in mg/L) is computed as the difference between the total suspended matter concentration (deduced from the remote-sensing radiances at 550 and 670 nm) and the phytoplankton biomass (derived from their Chlorophyll-*a* specific algorithm). All products (NAP and Chlorophyll-*a*) were validated according to additional in situ measurements (Gohin et al., 2008; Petus et al., 2010). In particular products accuracy has been extensively validated against coastal in situ measurements from 15 stations located along the French Atlantic coast and 3 stations along the Mediterranean coast, all stations recording the turbidity

every 15 days between 2003/01/01 and 2009/12/31. The results show a confidence of 95% (see Figure 13 of Gohin et al. (2010) in French language) between yearly mean and percentile 90 of the turbidity (in NTU) recorded at all stations and the total suspended matter measured by the MODIS sensor (converted in NTU according to Nechad et al. (2010)). Part of those results can also be found in Gohin et al. (2020) including VIIRS (Visible Infrared Imaging Radiometer Suite) and OLCI (Ocean Land Color Instrument) satellite sensors, along with MODIS.

For a fine comparison between satellite images and outputs from the MARS model, the NAP particles observed by the satellite comprises not only mineral particles (labeled as SPIM, see the previous Section 5.4.2) but also detrital particles, yielding to (e.g. Bellacicco et al. (2019)) :

$$\text{NAP} = \text{SPIM} + \text{det} \quad (5.1)$$

Where *det* represents the number of detrital particles. For instance, Fig. 5.1c displays the mean SSSC obtained with the satellite (based on the NAP algorithm) at the ocean surface. In particular, it well shows that, contrary to the MARS model, there is a weak but significant SSSC mean signal (of the order of 1 mg/L) above the abyssal plain. This signal obviously corresponds to the detrital particles linked to the open sea primary production. Nonetheless, for simplification purposes, in Section 5.6 the suspended matter will be called using the general term SSSC (Surface Suspended Sediment Concentration).

In the OSE experiments, our dataset is comprised of daily MODIS images spanning from 2003/01/01 to 2019/12/31. During that period, the mean cloud cover amounted to about 75% of the whole oceanic surface of the imaged area. Each MODIS image has a 1 km spatial resolution, which leads to a 256X256 pixel grid for our case-study region. The area extends from latitude 45°17'N to 47°50'N, and longitude 4°55'W to 1°5'W. In terms of validation, as mentioned in Section 5.4.1, this area covers the main part of the Bay of Biscay (BoB) which experiences various physical and biological forcings. This bay is a well-known fine testing ground in terms of spatial and temporal variability of the turbidity (e.g. Borja et al. (2018)).

5.5 Methods

This section details the proposed space-time interpolation of satellite-derived SSSC fields based on 4DVarNet scheme (Fablet et al., 2021a) in Section 5.5.1, along with the associated evaluation in Section 5.5.2, performance metrics in Section 5.5.3 and benchmarked approaches in Section 5.5.4.

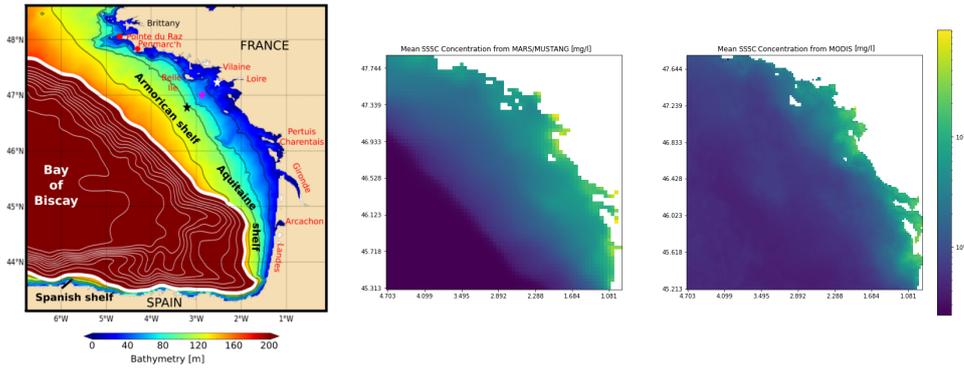


FIGURE 5.1 – Left) Bathymetry of the Bay of Biscay. Black lines represent isobaths 40, 70, 100, and 130 m. The thick white line (corresponding to the 180 m isobath) approximately delimits the shelf edge. Middle) Mean spatial distribution of SSSC (in mg/L) from the MARS-MUSTANG hydrosedimentary model (from 2007 to 2011) (Mengual, 2016). Right) Mean spatial distribution of SSSC (in mg/L) from MODIS observations for the same period.

5.5.1 4DVarNet scheme

Deep learning schemes have rapidly become the state-of-the-art approaches for a wide range of pattern recognition and image processing applications, including geoscience (Zhang et al., 2016). This also includes neural network approaches dedicated to interpolation issues. Recent studies (Barth et al., 2020b; Beauchamp et al., 2020; Fablet et al., 2021a; Vient et al., 2021) have stressed the relevance of end-to-end deep learning architectures to address space-time interpolation issues with large missing data rates. Especially, 4DVarNet schemes, which rely on variational data assimilation formulation, have been shown to significantly outperform zero-filling learning-based strategies for interpolation problems Fablet et al. (2021b). Applications to sea surface height mapping from satellite altimetry Beauchamp et al. (2020); Fablet et al. (2021a) further support their relevance over other data-driven approaches to better retrieve fine-scale patterns. This study presents an application of 4DVarNet schemes to SSC interpolations. We provide below a short introduction to 4DVarNet schemes. We refer the reader to Fablet et al. (2021b) for a detailed presentation.

4DVarNet framework relies on the formulation of the interpolation problem as a variational minimization issue :

$$\hat{x} = \arg \min_x \|y - x\|_{\Omega}^2 + \lambda \|x - \Phi(x)\|^2 \quad (5.2)$$

Ω refers to the space-time subdomain where observation y are sampled. Let us point out that we consider a matrix formulation where x and y refer to space-time process, represented by 2D+t tensors. Operator Φ states the space-time prior on state x . Φ may

refer to the flow operator when considering a dynamical ODE or PDE prior. Φ can also derive from a covariance-based prior as in the optimal interpolation framework. Here, following Fablet et al. (2021a), we consider a state-of-the-art neural architecture, namely a UNet (Gao et al., 2022), such that Φ can be regarded as a projection operator. λ states the relative importance of the observation term of the prior in the minimization problem.

Given minimization problem (5.2), 4DVarNet framework implements a trainable iterative gradient-based solver with a predefined number of iterations. As sketched by Fig.5.2, it delivers a end-to-end architecture which exploits as inputs gappy observation data and outputs a gap-free state. The trainable solver combines the evaluation of the gradient of variational cost (5.2) using automatic differentiation tools embedded in deep learning framework with a recurrent network, namely a convolutional LSTM. A more detailed description of 4DVarNet schemes including experiments with different parameterizations of operator Φ and of the trainable solver can be found in Fablet et al. (2021a).

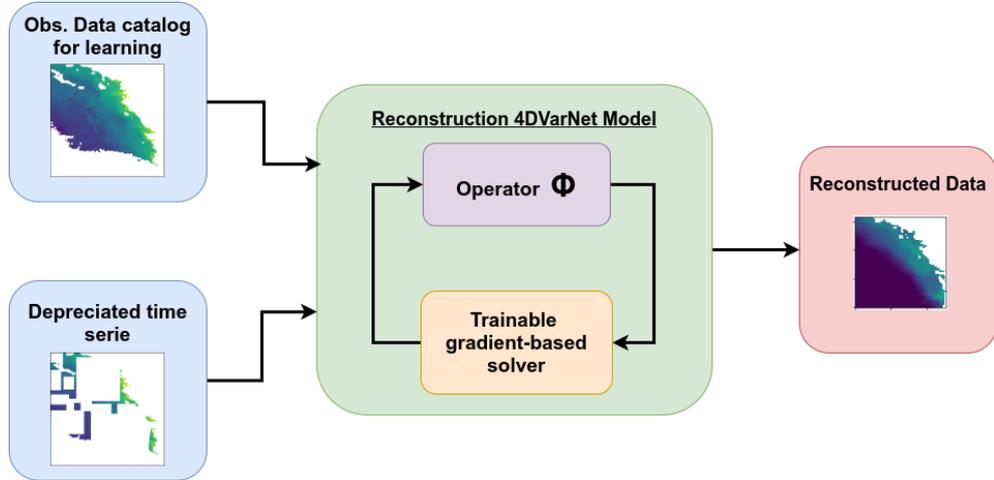


FIGURE 5.2 – Workflow of the proposed framework for the reconstruction NAP field with the 4DVarNet. A given observation dataset catalogue is provide for the learning phase of the model. The interpolator Φ is trained and optimised by the solver. Then the model is able to reconstruct the irregularly sampled time series input into the reconstructed data.

Regarding learning issues, we consider here training losses evaluated on gappy data as no gap-free reference data are available. For the trainable solver, we consider a convolution LSTM-based solver with a 35-dimensional hidden state.

5.5.2 Training and evaluation framework

For training and evaluation purposes, the whole set of data is divided in two parts. All the available data except those of the year 2011 are dedicated to the training while the year 2011 is reserved for the evaluation.

In OSSEs, the "nature run" (or model simulation) provides the reference gap-free field used as ground truth to asses the performance of the interpolation. This helps in

evaluating the performance of the associated interpolation methods. For OSEs with real satellite data, no such gap-free reference field is available. We exploit a random sampling strategy as follows. For the considered dataset, we randomly sample a binary mask applied to the real satellite observation patterns. As such, we withhold some observed data from the input data provided to the interpolation methods and use them as reference data to assess reconstruction performance metrics. We may emphasize that this dataset is not an actual groundtruthed dataset as real satellite data are noisy. Available in situ datasets are too scarce to provide a relevant alternative. In the reported experiments, we subsample 50% of available satellite-derived observations for dates at which at least 500 observation points are available (i.e., 3% of the total pixels located above the ocean). We exploit two random strategies : the "pixel-wise" strategy randomly sample 50% of the observed pixels ; the "patch-wise" strategy randomly sample $H \times W$ patches, width W and height H being randomly sampled according to a uniform distribution between 0 and 100. We report in (Fig.5.3) examples of randomly sampled patterns. Contrary to the "pixel-wise" strategy, the patch-wise one better match the expected independence between the training and test datasets. In this work the real clouds strategy (Barth et al., 2020a) was not evaluated because because we want to better control the level of 50% of available data.

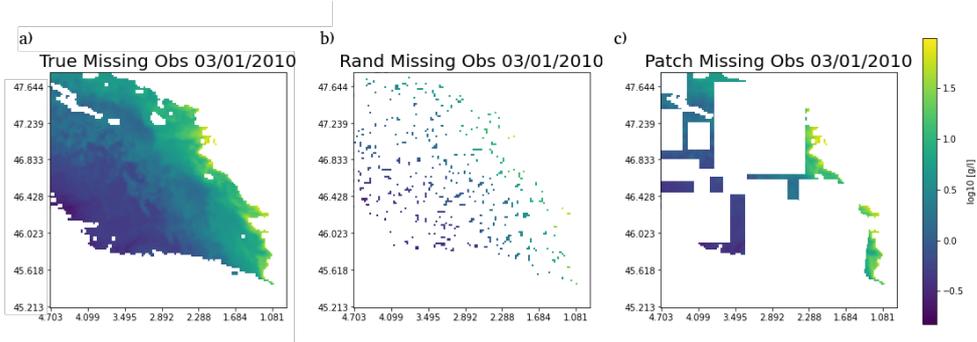


FIGURE 5.3 – Different sampling strategy for validation by using missing observations : a) True observation from MODIS L2 image dataset b) Random points sampling strategy for observation sampling c) Patch sampling strategy for observation sampling

5.5.3 Performance metrics

In terms of performance metrics, we exploit the explained variance (R-score) and the global root mean square error (RMSE) applied to the \log_{10} of concentration values. The latter leads in fact to the RMSLE (root mean square log error) of concentrations, which can be expressed as following :

$$RMSLE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\log_{10}(C_i^{Pred}) - \log_{10}(C_i^{Obs}) \right)^2} \quad (5.3)$$

where C_i^{Pred} are predicted values of SSSC concentrations and C_i^{Obs} are the observed values, i stands for the index of evaluated data, n refers to the number of available observations points. All RMSLE and R-Score in all the following Tables (5.1,5.2,5.3,5.4,5.6) are evaluated with a total number of points of the order of 10^6 . We also evaluate these metrics for the gradient of the \log_{10} of SSSC fields. This validation of results with the standard RMSE on \log_{10} values (i.e. RMSLE) has been chosen for two main reasons :

- First, the statistical distribution of particle concentrations typically follows a lognormal probability distribution (Eleveld et al., 2008) so that \log_{10} values follow a Gaussian distribution. Then, providing bias are negligible (all bias in all experiments were found equal or inferior to 0.01), the RMSE is comparable to a standard deviation and then completely characterizes the statistical distribution ;
- Second, the evaluation on \log_{10} of concentrations emphasizes the validation of low concentrations which are important in the determination of water transparency, which is a main goal in our studies.

5.5.4 Reference methods for comparison

For benchmarking purposes, we consider two state-of-the-art approaches, an optimal interpolation Cressie and Wikle (2011); Daley (1997) and DINEOF scheme (Beckers and Rixen, 2003). The Optimal Interpolation (OI), also referred to as kriging, is a method widely applied in ocean remote sensing and geoscience. Numerous operational satellite-derived products in earth science rely on OI. We refer the reader to Oliver and Webster (2007) for a detailed review. In our experiments, we implement an OI with a Gaussian covariance model empirically tuned through cross-validation experiments. DINEOF (Data Interpolating Empirical Orthogonal Functions) is an EOF-based technique for the reconstruction of gap-free fields from irregularly-sampled observations. It has been successfully applied to satellite-derived sea surface products (Alvera-Azcárate et al., 2015), including sea surface turbidity (Liu and Wang, 2016; Vient et al., 2021). DINEOF iterates a projection-reconstruction step using the EOF basis, while observed variables are kept unchanged after each iteration. Here, we select the first 56 EOF modes to account for $\tilde{97}\%$ of the Variance of the considered datasets and apply a 10-iteration DINEOF, through cross-validation iterative process². We may point out that the proposed 4DVarNet framework can be regarded as a generalization of DINEOF with a state-dependent covariance model and a gradient-based solver instead of the fixed-point solver implemented by DINEOF (Fablet et al., 2021a).

². DinEOF used in this chapter refer to a simplified version of the method described in 3.1.3, and will result in noise being included in the reconstruction. The number of EOF modes should be determined by cross-validation.

5.6 Results

We report below the synthesis of the considered numerical experiments. First, a global analysis of all benchmarking experiments are reported in Section 5.6.1. From these results, Section 5.6.2 focuses on the comparison between OSSE and OSE performance metrics and 5.6.3 on the performance of our specifically proposed 4DVarNet method.

5.6.1 Global Performance

Table 5.1 and 5.2 summarizes the performance metrics evaluated with all configurations and interpolation methods. The 4DvarNet method clearly outperformed the other methods tested here for all scores and experiments. For instance, in OSE, so when real satellite data are used, 4DvarNet improves R-scores by about 30% w.r.t. OI and 23% w.r.t. DINEOF (slightly depending on the chosen subsampling strategy)³. We effectively note that reported performance metrics are consistent for the two random sampling strategies used to compute these metrics for the real satellite-derived datasets. The slightly better performance observed with the pixel-wise strategy relates to a lower independence between the input data and the evaluation dataset. A greater stability between the metrics computed according to these two strategies then indicates better generalization properties as exhibited for 4DVarNet scheme. In OSSE, so when simulated data are used, the improvement in R-score with 4DVarNet appears much lower (about 6% w.r.t. OI and 5% w.r.t. DINEOF) but its final R-score is much higher (nearly 97% for OSSE instead of nearly 90% for OSEs). Globally speaking it appears that R-scores related to OSSE are pretty different than those related to OSEs. This simply reflects the different content in terms of data and data errors between simulated and real satellite images (see the discussion about this subject in Section 5.7.1).

Finally, it is interesting to note the really poor performance of the standard OI method when applied to real data. Indeed we can see that the correlation between interpolated and real satellite values only amounts to about 60%. Concerning the RMSLE values, Table 5.2 clearly shows consistent RMSLE values with regard to the R-score ones. In particular OI appears to have low accuracy when applied to real data (around 0.32) and 4DVarNet proved to have the highest accuracy with either simulated or real data (around 0.16 with real data and 0.10 with simulated ones).

5.6.2 OSSE versus OSE comparison

Table 5.3 allows a further analysis on how performance metrics for simulation datasets (OSSE) inform the interpolation performance for real satellite-derived datasets (OSE).

3. DinEOF used in this chapter refer to a simplified version of the method described in 3.1.3, and will result in noise being included in the reconstruction. The number of EOF modes should be determined by cross-validation.

Experiment	Dataset	Sub-sampling	OI	DINEOF	4DVarNet
OSE	MODIS	Random	60.5	76.4	89.5
OSE	MODIS	Patch	56.5	73.8	87.3
OSSE	MARS	-	90.4	91.3	96.6

TABLE 5.1 – R-score performance in % for the considered methods and validation configurations. OSE refers to the real data (MODIS) interpolating process. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS results.

Experiment	Dataset	Sub-sampling	OI	DINEOF	4DVarNet
OSE	MODIS	Random	0.304	0.237	0.156
OSE	MODIS	Patch	0.346	0.253	0.168
OSSE	MARS	-	0.176	0.167	0.104

TABLE 5.2 – RMSLE performance in $\log_{10}[\text{mg/L}]$ for the considered methods and validation configurations. OSE refers to the real data (MODIS) interpolating process. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS results.

The minus signs in front of all values show that, when applied to real satellite data, the accuracy of all tested interpolation methods worsen. Of all interpolation methods, OI is losing accuracy the most. This could be due to a misrepresentation of the satellite data noise using this method (see Section 5.7.1). Concerning the other methods we point out that OSEs involve an additional complexity at two levels for the training procedure : the reference data are noisy, the reference dataset is gappy. This explains why we also report a lower performance for these methods for OSE settings compared with the OSSE baseline. Here we can see that DINEOF loses less accuracy than 4DVarNet, the latter losing less accuracy than OI. However OSSE performance metrics provide a sensible assessment of the performance for the real satellite-derived dataset. This is less true for OI which performance is degraded by either 73% or 97% depending on the applied subsampling strategy (Random or Patch). The latter likely relates to the spatial correlation length of the considered covariance model, such that the interpolation capability degrades at a distance greater than the correlation length.

Sub-sampling	OI	DINEOF	4DVarNet
Random	-73%	-42%	-50%
Patch	-97%	-51%	-62%

TABLE 5.3 – Evolution of accuracy, from OSSE to OSE, in the form of a performance rate according to the formula $1 - \text{RMSLE}(\text{OSE}) / \text{RMSLE}(\text{OSSE})$ expressed in percentage, with using the RMSLE reported in Table 5.2

5.6.3 4DVarNet performance

We analyze further the clear improvement reported for 4DVarNet. Table 5.4 reports the relative performance gains w.r.t. OI and DINEOF. When dealing with real data, it shows a great improvement of around 50% over OI and a little less, 34%, over DINEOF. Also these two values quantifying the improvement appear nearly insensitive to the subsampling strategy used (Random or Patch). The OSSE is able to quantify a similar amount of improvement over the two methods (OI and DINEOF) with a value of around 40%, but does not see much difference between OI and DINEOF (41% and 38% respectively)⁴. This discrepancy between OSSE and OSEs could be due to a different representation of the satellite data noise using OI and DINEOF methods (see Section 5.7.1).

Experiment	Dataset	Sub-sampling	OI	DINEOF
OSE	MODIS	Random	49%	34%
OSE	MODIS	Patch	51%	34%
OSSE	MARS	-	41%	38%

TABLE 5.4 – Evolution of accuracy, from OI or DINEOF to 4DVarNet, in the form of a performance rate according to the formula $1 - \text{RMSLE}(4\text{DVarNet}) / \text{RMSLE}(\cdot)$ expressed in percentage, with using the RMSLE reported in Table 5.2

Error	Unit	Data Domain	OI	DinEOF	AnDA	AE-4DVarNet	GE-4DVarNet
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	All	0.176	0.167	0.162	0.142	0.104
R-score	%	All	90.4	91.3	91.9	93.7	96.6
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	Observed	0.056	0.038	0.049	0.095	0.094
R-score	%	Observed	98.5	99.4	99.3	92.8	96.4
RMSE	$\log_{10}[\text{g/L}]$	Unobserved	0.187	0.177	0.171	0.151	0.106
R-score	%	Unobserved	89.5	90.5	91.2	93.2	96.6

TABLE 5.5 – RMSE and R-score computed for all methods over the SSSC validation period : these scores are computed globally (All) and over the observed data (Observed) and the missing data (Unobserved) patterns.

The evaluation of the interpolation metrics for the gradient of the SSSC fields in Table 5.6 shows highest R-score for the 4DVarNet method in retrieving fine-scale patterns. Previous work with similar 4DVar based architecture show a significant improvement of high resolution spatial pattern Fablet et al. (2023). Surprisingly, the metrics are much better for the OSE. We interpret this aspect as a consequence of the lower spatial variability observed in numerical simulations compared with satellite-derived data as supported by Fig5.4. The mean gradient norm of 4DVarNet nicely recovers the main front structures of the true field compared with the other approaches. More specifically, these gradient fields depict a clearly visible contour offshore. This contour broadly follows the 50 m isobath which borders the “Grande Vasière”. The OI clearly overestimates the spatial gradient and

4. DinEOF used in this chapter refer to a simplified version of the method described in 3.1.3, and will result in noise being included in the reconstruction. The number of EOF modes should be determined by cross-validation.

does not succeed in capturing the finest scale. Though not as bad, DINEOF (based on EOF decomposition) may be limited by the explained variance rate at 97% of the selected EOF components (comes from the simplified DinEOF version used in section 3.2.1). Besides, for real satellite-derived data, the mean gradient field involves local artifacts. By contrast, 4DVarNet retrieves mean gradient fields which are close to the reference in coastal areas without an overestimation pattern. We can also note a spatial smoothing which may partially relate to the observation noise of real satellite-derived measurements.

Experiment	Dataset	Sub-sampling	OI	DINEOF	4DVarNet
OSE	MODIS	Random	58.3	72.5	88.9
OSE	MODIS	Patch	56.6	67.4	91.2
OSSE	MARS	-	16.0	40.6	63.7

TABLE 5.6 – Gradient norm reconstruction performance R-score evaluation for different methods and validation configurations in %. OSSE dataset refers to the previous work (Vient et al., 2021) based on the MARS/MUSTANG results in an OSSE application. MODIS dataset refers to the real data interpolating process, with learning based only on observations. The sub-sampling strategy is described in Section 5.5.2.

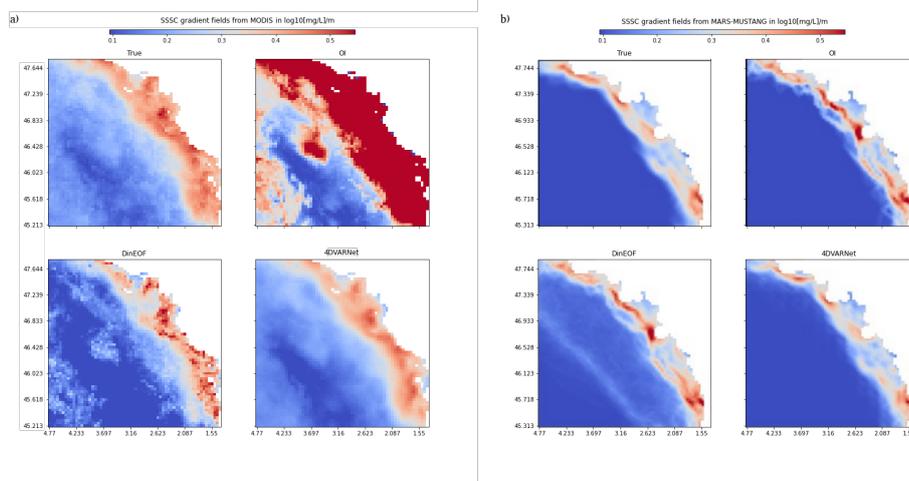


FIGURE 5.4 – Reconstruction norm of SSSC gradient fields for the OSE (MODIS) and OSSE (MARS) application for the whole validation period : a) OSE configuration b) OSSE configuration.

5.7 Discussion

This study presents and evaluates a novel learning-based interpolation approach referred to as 4DVarNet for the space-time interpolation of satellite-derived sea surface suspended sediment concentrations. Numerical experiments on real and synthetic datasets support the relevance of this scheme compared with state-of-the-art approaches. We

further discuss below our main contribution, namely the extent to which OSSEs can inform performance metrics for real datasets (Section 5.7.1), the relevance of neural network schemes for operational applications (Section 5.7.2) and the ability to retrieve fine-scale patterns (Section 5.7.3).⁵

5.7.1 From OSSE to OSE

A first aim of this study was to compare the performance of interpolation methods when applied to simulated data (through OSSE) and real satellite data (through OSE). At first the comparison shows that all the methods lost accuracy by a significant amount (more than 40%) when applied to real data. The observation noise in real satellite data may be the driving factor for this pattern. Indeed, in our OSSE, simulated data involve a simple (white) Gaussian noise evenly distributed throughout the whole dataset. By contrast, errors in real satellite data are expected to be much more complex. OI and DINEOF methods may be more impacted as they explicitly or implicitly hypothesize Gaussian noise models. In this retrospect, numerous studies have stressed the ability of neural network approaches to address denoising problems with non-Gaussian noise patterns (Guo et al., 2017; Zhang et al., 2016).

Beyond the observation noise, other effects may support the difference in performance between OSSE and OSE. For instance, due to the random subsampling strategy, OSSEs involve a slightly lower missing data rate and the reference training data is noise-free. We may also note that we consider a 16-year training time series for OSEs compared with a 4-year one for OSSEs such that the pixel-wise amount of training data is the same between OSSEs and OSEs. We may, however, expect a greater intrinsic variability over 16 years which may in turn result in a more complex interpolation problem. We could account for these different aspects of the design of OSSE under the hypothesis that we are provided with a longer numerical simulation.

Nevertheless, the numerical simulations used in the OSSEs cannot reveal all the complexity of real satellite data. The hydrosedimentary model does not take into account all the processes we observe in a satellite image. This is, of course, a major and typically well-known drawback of OSSE (e.g. Hoffman and Atlas (2016)). Here, for instance, a typical discrepancy we can see between the model and a satellite image relate to the biogenic detritus, which follows the dynamics of the oceanic primary production, and which is obviously not modelled by the MARS model (see Equation 5.1 and the discussion about the difference between SPIM and NAP in Sections 5.4.2 and 5.4.3). The detrital particles can be well observed by satellite remote sensing of ocean colour, especially beyond the shelf break (i.e. above the abyssal plain) where the MARS model always shows concen-

5. NB. Des exemples de résultats de simulations (vidéos) ont été présentés au cours de la soutenance de thèse. L'ensemble des codes et données permettant de les générer sont disponible sur le GitHub mentionné en bas de l'article.

trations (off the shelf) close to zero. Especially coccolith-derived turbidity is amongst the most intense signal detected by a satellite in these areas (Perrot et al., 2018). Hence, in an OSE, interpolation methods have to address not only the dynamics of purely mineral SPIM particles but also dynamical patterns of detrital particles driven by the primary production.

Finally, we must not forget that resulting errors in the OSE are biased in the sense that the results are compared with already noisy satellite data, contrary to the OSSE where results are compared with a "true ocean" (the modelled ocean) assumed to be a strict exact solution. Therefore OSE validation errors are significantly larger than those of the OSSE. However, given these different aspects, the worsening of the interpolation performance of 4DVarNet from the OSSE to the OSE remains fairly limited. This supports the relevance of OSSEs as an initial test bed for development and evaluation of interpolation algorithms, especially to rank new schemes with respect to previously benchmarked ones within a fully-controlled environment.

5.7.2 Comparison of interpolation methods

Our numerical experiments clearly stress that state-of-the-art data-driven interpolation methods can significantly improve the retrieval of operational gap-free satellite-derived products which are often based on OI schemes. Both 4DVarNet and DINEOF can account for more complex covariance pns than the one used by the OI, including anisotropic ones (see in particular (Saulquin et al., 2019)) for they developed an anisotropic OI method for that case). We believe however that a key issue of OI for our case-study is its poorer ability to deal with the noise patterns of real satellite-derived observations.

DINEOF performs much better than OI, particularly with real satellite data. This is what our present article demonstrates by the results obtained with the OSE experiments (using real data) compared with what was expected (similar performance between OI and DINEOF) after the OSSE experiments (using simulated data). Furthermore it has been well demonstrated (Barth et al., 2020b) that DINEOF is well suited for complex areas comprising at the same time coastal and open sea domains. Given that DINEOF is quite simple to implement and does not require a strong expertise, this method should definitely be considered as a baseline scheme for routine operational ocean colour products similar to those studied in this article. For instance, at a higher spatial resolution, it has recently been applied by the HIGHROC consortium to deliver Sentinel 2 ocean colour L4 products corresponding to the CMEMS product OCEANCOLOUR_IBI_BGC_HR_L4_NRT_009_210⁶ for the IBI area.

4DVarNet further stresses the greatest potential of physics-informed learning scheme, which combines some physics-aware representation (here, a variational data assimilation

6. <https://doi.org/10.48670/moi-00108>

formulation), with the computational efficiency of deep learning. Our results are in line with recent studies dedicated to other satellite-derived products, such as ocean colour (Barth et al., 2020a) and satellite altimetry (Fablet et al., 2021b). Compared with Barth et al. (2020a), 4DVarNet involves an additional modeling flexibility through the learning of a trainable gradient-solver for the variational cost. This also opens the floor to interpolation schemes using multi-source input data through additional trainable observation operators (Fablet et al., 2021b). As such, this work will likely serve as baseline for future work aiming at further improving the space-time reconstruction of SSSC dynamics.

5.7.3 Retrieval of fine-scale turbidity patterns from satellite data

Given the irregular sampling of satellite-derived observations, the retrieval of fine-scale patterns is a critical issue to fulfill especially operational needs such as the identification of specific areas where waters are highly transparent, which threatens Navy submarines over possible airborne visual detection. Our experiments stress significant differences in the ability of data-driven approaches to retrieve fine-scale patterns. By construction, OI schemes with Gaussian covariance models cannot reconstruct scales smaller than the a priori correlation distance. DINEOF schemes also relate to covariance-based models, but result in more complex covariance models learned from data. This may actually improve the reconstruction of space-time dynamics. 4DVarNet schemes may be regarded as moving a step further with non-linear quadratic priors through operator Φ in 5.2, rather than linear-quadratic ones. We regard the combination of such a prior and of a trainable solver as the key features which support the improvement reported for the proposed 4DVarNet schemes (Fablet et al., 2023).

In our experiments, we exploit RMSE metrics computed for the norm of the gradient of SSSC fields to assess the retrieval of the fine-scale patterns (Figure 6.2). We may note that OSSE scores in Tab.5.6 are significantly lower than OSE ones, which may be surprising. Numerical simulations involve lower gradient values, whereas real satellite data depict much sharper spatial gradients as illustrated in Fig.5.4. Given the spatial grid resolution of the MARS model (2.5 km), we expect numerical simulations to resolve spatial scales from 20 km. By contrast, the spatial resolution of MODIS satellite observations is close to 1 km. Besides, as mentioned in Subsection 5.7.1, numerical simulations do not include all the processes in play in real satellite observations such as the turbulent behaviour in detrital NAP processes. Overall, this results in lower mean gradient norm values for the OSSE which in turn leads to a lower R-score as this score is normalized by the mean gradient norm. Despite these differences, OSSE and OSE metrics share the same ranking of the benchmarked methods for gradient-related scores. Future developments of hydrosedimentary simulations may improve the ability to reproduce the actual variability of SSSC fields.

Contrary to OI and DINEOF approach, the proposed 4DVarNet scheme leads to better gradient-based metrics when considering the patch-based random sampling strategy. A similar behaviour is observed when applying this method (4DVarNet) to sea surface satellite heights and sea surface temperatures from satellites (Fablet et al., 2023). In our case this likely relates to a larger number of training examples with truly observed pixel-level gradients, as, by construction, the pixel-level random sampling increases the likelihood that two neighbouring pixels are not observed. This further highlights the ability of 4DVarNet schemes to exploit fine-scale patterns in real observation datasets. It also suggests to further explore these random sampling strategies in future work to make the most of available gappy observation datasets.

5.8 Conclusion

This study presented a novel end-to-end neural scheme for the space-time interpolation of remote sensed sea surface suspended sediment fields, referred to as 4DVarNet. We assessed its reconstruction performance for both real and simulation-based datasets. We reported a clear improvement with respect to the state-of-the-art schemes, namely OI and DINEOF, in terms of global interpolation errors of the retrieval of SSSC gradients. To our knowledge, this study is among the few ones which demonstrate the readiness of end-to-end neural scheme for the processing of L4 gap-free satellite products.

Besides its integration in operational processing pipelines for satellite-derived products, future work could exploit further variational formulation which 4DVarNet relies on. Through new forcing terms in this variational formulation, it provides a well-posed basis towards the exploitation of forcing variables, for instance associated with waves and barotropic current processes, to further improve the reconstruction of SSSC fields. Similarly, the proposed scheme naturally extends to short-term forecasting applications, which are also of key interest. Overall, we expect this study to serve as a basis for the development of physics-informed deep learning frameworks for ocean remote sensing.

5.9 Material

The computer code and dataset for this study can be found in the <https://github.com/Jvient/4DVarNet-OSSE>.

MODÈLE DE PRÉVISION 4DVARNET BASÉ SUR LES OBSERVATIONS POUR LA PRÉVISION À COURT TERME DE LA SSSC

À l'image des chapitres de résultats précédents, la présentation sous forme d'article a été choisie pour présenter ces expériences. Cet article se destine à une publication future, mais n'est pas encore soumis à la relecture. Il traite d'expérience de prévisions court terme de la SSSC. Une nouvelle configuration de modèle 4DVarNet est mise en place pour permettre de passer d'interpolation à prédiction. Celle-ci intègre maintenant des forçages océaniques. Ce chapitre est l'occasion de traiter des limites des modèles basées sur la donnée et de discuter des apports des forçages dans ce type de problématique.

6.1 Résumé

La caractérisation de la dynamique des sédiments en suspension dans l'océan côtier fournit des informations essentielles pour les études scientifiques et les défis opérationnels concernant, entre autres, la turbidité, la transparence de l'eau et le développement de micro-organismes utilisant la photosynthèse, qui est critique pour la production primaire. La complexité des processus impliqués dans la dynamique sédimentaire rend difficiles les problèmes de prévision des dynamiques de surface. Dans la continuité des expérimentations précédentes, le modèle 4DVarNet ayant montré des résultats encourageants avec des interpolations de SSSC, il est testé dans un problème de prévision sur 20 jours. En plus de l'architecture d'apprentissage incluant les données manquantes, un protocole a été conceptualisé afin d'intégrer différents types de forçages pour améliorer les reconstructions. Les résultats de la méthode montrent qu'il est possible de produire des résultats satisfaisants. L'apport des forçages d'entrée est notable améliorant de 20% les horizons de précision. L'étude fait également ressortir une caractérisation des différents forçages en entrée et leurs effets sur le système.

6.2 Abstract

Characterization of suspended sediment dynamics in the coastal ocean provides essential information for scientific studies and operational challenges concerning, among others, turbidity, water transparency and the development of microorganisms using photosynthesis, which is critical for primary production. The complexity of the processes involved in sediment dynamics makes it difficult to predict surface dynamics. In the continuity of previous experiments, the 4DVarNet model having shown encouraging results with SSSC interpolations, it is tested in a 20-day forecasting problem. In addition to the learning architecture including the missing observation data, a protocol has been conceptualized to integrate different types of forcing to improve reconstructions. The results of the method show that it is possible to produce satisfactory results. The contribution of the input forcing is notable improving of 20% precision horizons. The study also highlights a characterization of the different input forcing and their effect on the system.

6.3 Introduction

The dynamics of marine sediment fluxes result from a combination of natural and anthropogenic forcing factors (Irabien et al., 2020; Owens, 2020). The main geophysical parameter studied here is the sea surface suspended sediment concentration (SSSC). SSSC dynamics is driven by the sediment load coming from land, with sediment resuspension occurring as a result of wave agitation, tidal currents, density and pressure/wind driven ocean circulation, but also from fish trawling and maritime development, such as dredging and dumping of sediments, aggregate extraction, installation of submarine cables, operation of offshore wind farms, oil and gas activities, etc. In addition to these latter anthropogenic stresses, others are expected in the foreseeable future through climate change, involving sea level and wave rise, altering remobilization and transport in the coastal zone, and sediment inputs from the mainland through alteration of the hydraulic regime of the watersheds due to changes in precipitation (Elliott et al., 2015).

Studying turbidity is a key issue in the study of coastal morphological evolution, habitat change, pollutant dispersion and behaviour (James, 2002; Larcombe and Morrison-Saunders, 2017; Tecchiato et al., 2015). Because turbidity induced by fine sediment suspensions, particularly near the ocean surface, impacts primary production by reducing the thickness of the euphotic zone (Mitchell and Cunningham, 2015). Quantifying suspended sediment concentrations and fluxes, at the continental shelf scale, is also a critical aspect of fulfilling the boundary conditions of their fine mesh coastal hydrodynamic models (Saulnier et al., 2021) used for impact studies. However, quantifying suspended sediment fluxes is generally a difficult task due to the complexity of the hydrodynamic and morphodynamic processes involved. In absolute terms, assessment of overall sediment dynamics

requires an understanding of the transport processes of mineral particles in the water column as well as their behaviour on the seafloor, with resuspension and consolidation processes embedded in the sediment, often under the influence of biota, impacting flocculation processes in the water column and biochemical behaviour within the sediment; (Diaz et al., 2020).

Methodologies already exist in order to give relevant forecasts of SSSC at the surface of the ocean. Those are mainly based on hydro-sedimentary complex simulations that require high computational power and time resources (Hewitt et al., 2017; Vance et al., 2016). To overcome these issues associated with these numerical models, we propose here the use of data-driven Machine learning methods to predict the daily SSSC at the surface. The proposed method here is called 4DVarNet and is based on a previous work for nowcast interpolations of SSSC. 4DVarNet is based on a 4DVar architecture where equations are resolved by neural networks through a learning process based on past data. We exploit MODIS observations as learning set for the model, coupled with ocean hydrodynamic forcings and bathymetry data. Three main forcing were then identified and implemented in the model, the Tidal coefficient, Bathymetry and Waves.

The article is organized as follows. Section 6.4 details the considered datasets, including the forcing parameters used in this study. Section 6.5 details the forecasting methodology applied on observation data and selected forcing parameters (which are based on the 4DVarNet scheme). Section 6.7 shows the global performances for the short term forecast. And finally Section 6.8 compares the impact of forcing inputs and shows the limits of the 4DVarNet methods.

6.4 Data

The study area, presented in the first subsection, is located in the Bay of Biscay. The main geophysical parameter studied is the sea surface suspended sediment concentration (SSSC), which is related to the sediment dynamics. We present the datasets considered in this study, the satellite-derived MODIS data and the forcing parameters and data used in this study.

6.4.1 Bay of Biscay

The study area encompasses a large part of the northern region of the Bay of Biscay (BoB), located on the west coast of France (Northeast Atlantic). In this area, the bathymetry extends from the shallow waters of the coast to the deep waters of the abyssal plain (about 3000 m). The continental shelf is wide. The shelf break, dotted with canyons, crosses the area as a transverse line from its northwest to southeast corner. The sedimentology of the BoB floor can be divided into three main seabed types : a large

muddy area in the middle of the shelf called the "Great Mudflat" (e.g., (Mengual et al., 2019)), coastal areas characterized by rocky and sandy bottoms, and the shelf break with a predominance of rocks. The water column is subject to a variety of forcings and physical processes : tides, internal waves (especially from the shelf break), trapped waves, density gradients and wind-induced seasonal circulation (including winter storms), mixing and stratification, eddies, fronts, filaments, upwelling/downwelling and river plumes ((Borja et al., 2018; Castaing et al., 1999; Mengual et al., 2019)). Concerning the latter, the Gironde and the Loire are the main sources of water loads and suspended sediments (Castaing et al., 1999). Their estuaries are located at the northern latitudes of 45.6° and 47.2° respectively. The dynamics of particles in the surface layers of this oceanic zone are determined by lithogenic and biogenic processes, the latter being well characterized by phytoplankton blooms appearing notably in spring along the Armorican shelf break.

6.4.2 Satellite data

Our satellite-derived dataset is based on the MODIS sensor images acquired on board both Aqua and Terra satellites. The MODIS sensor is part of the 1991 NASA-initiated Earth observation system. It aims at monitoring, among others, the ocean dynamics. We here exploit Level-2 geophysical variables that were processed with Gohin et al bio-optical algorithm (Gohin et al., 2008). The normalized remote-sensing reflectances were then processed for the estimation of Chlorophyll-a (Chl-a) and Non-Algal Particles (NAP), named SSSC in this work, concentrations using their algorithm that was specifically calibrated for the Bay of Biscay using dedicated in situ measurements from 20 field cruises that took place over the shelf, and which represent a total amount of about 1000 in situ data points. NAP is defined as the difference between total suspended matter and phytoplankton biomass, the latter being derived from Chl-a. The estimation of Chl-a derives from the application of a satellite-specific lookup table to the spectral remote-sensing reflectance. All products were validated according to additional in situ measurements (Gohin et al., 2005). The accuracy of this algorithm, applied to MODIS, has been extensively validated against additional in situ measurements from 15 coastal stations located along the French Atlantic coast and 3 stations along the Mediterranean coast, all stations recording the turbidity every 15 days between 2003/01/01 and 2009/12/31. The results show a confidence of 95% between yearly mean and percentile 90 of the turbidity (in NTU) recorded at all stations and the equivalent (in NTU) measured by the MODIS sensor.

6.4.3 Forcing data

Three forcing parameters were selected with the idea of improving performances with the forecast of SSSC Bathymetry, Tides and waves. Bathymetry and Tides are derived from observations, and Waves - comes from the simulation output of a hydrodynamic

model (WAVEWATCH III, or WW3 for short). Bathymetry is a static 2D space field parameter. Tides are represented by a 1D temporal series. Waves are given by a 3D field (2D spatial and time).

6.4.3.1 Bathymetry

In this work, to simplify the description of data pools, the Bathymetry is considered as a "forcing" and then embedded in the same data pool as the Forcings (Waves and Tides). This bathymetry field comes from the Sextant database hosted by IFREMER. This Digital Terrain Model (DTM) is the result of a compilation of measurements collected between 2008 and 2014 and prior DTMs in the Bay of Biscay given by SHOM (French Marine Oceanographic Service). This field dataset is available at a resolution of 500 m (selected for the study) and 1000 m. For information, this bathymetry is the one used in the MARS/MUSTANG model exploited in a previous work in OSSE experiments with the 4DVarNet method (Mengual, 2016; Vient et al., 2021).

6.4.3.2 Tides

The tidal forcing we chose is a mean intensity given by an index called in France the "coefficient de marée" (tidal range index normalized to the range observed at the Brest harbour located in Brittany, France). This index is only valid along the French Atlantic coasts. Twice a day this index gives an estimated level of the tidal range relative to the total range observed in a given area. The "coefficient de marée" is provided by the SHOM (French Hydrographic Service). Two semi-diurnal tidal coefficients are daily given and provide a complete one dimension series from 2003-01-01 to 2018-01-01.

6.4.3.3 Waves

WAVEWATCH III (WW3) code includes a phase-averaged wave model that resolves the random phase spectral action density balance equation for a spectrum of wave numbers and directions (in our case, 24 directions and 32 frequencies) on an unstructured grid (horizontal resolution ranging from 10 km offshore to 200 m nearshore). This hindcast provides wave statistical parameters such as semi-orbital excursion and orbital velocity near the bottom, peak period, significant wave height, and mean direction. Significant height (H_s) represents the average height (measured between crest and trough) of the third-highest waves. It was computed according to the formulation of Jonsson (1966), using the spectral expression of near bottom excursions and velocity provided by the WW3 code, and a wave-induced friction factor also depending on the orbital excursion. The daily H_s is used as the wave forcing feature.

6.5 Methods

This section details the proposed forecasting approach of satellite-derived SSSC fields based on 4DVarNet scheme (Fablet et al., 2021a) in Section 6.6.2, along with the considered evaluation framework, in Section 6.6.1, performance metrics in Section 6.7.1 and results of the forecast in Section 6.7.

6.6 Proposed 4DVarNet scheme

Deep learning schemes have rapidly become the state-of-the-art approaches for a wide range of pattern recognition and image processing applications, including in geoscience (Zhang et al., 2016). Some recent studies (Barth et al., 2020b; Beauchamp et al., 2020; Fablet et al., 2021a; Vient et al., 2021) has stressed the relevance of end-to-end deep learning architectures to address space-time interpolation issues with large missing data rates. In particular, we demonstrated in chapters 4 and 5 the reliance of 4DVarNet schemes for the interpolation of SSSC dynamics. Here, we further investigate this general framework and develop an observation-driven short-term forecasting 4DVarNet scheme.

The proposed approach relies on the statement that short-term forecasting problems can be regarded as space-time interpolation problems where no observation data are available for forecasting time steps. Formally, we rely on the following variational formulation :

$$\hat{x} = \arg \min_x \|y - x\|_{\Omega}^2 + \lambda \|x - \Phi(x)\|^2 \quad (6.1)$$

where x and y refer respectively to the space-time process to be forecasted and the observation process over a given time period $[t_0 - \Delta_o, t_0 + \Delta_f]$, where Δ_o refers to the number of days of observations considered up to time t_0 and Δ_f to the forecasting horizon from time t_0 to $t_0 + \Delta_f$. $\Omega = \{\Omega_{t_0 - \Delta_o}, \dots, \Omega_{t_0}, \dots, \Omega_{t_0 + \Delta_f}\}$ states the observation sampling patterns. By construction, in the considered short-term forecasting application, sampling masks $\Omega_{[t_0, t_0 + \Delta_f]}$ for the forecasting time-steps $\Omega_{t_0 + \Delta_f}$ are empty and sampling masks $\Omega_{[t_0 - \Delta_o, t_0 - 1]}$ refer to gappy satellite-derived observations due to the presence of clouds. We consider in Eq.6.1 a matrix formulation to simplify the notations and drop space and time variables. In Eq.6.1, operator Φ states the space-time prior on state x . Rather than covariance-based as in optimal interpolation schemes or PDE-based priors in model-driven ones, we follow (Fablet et al., 2021a) and exploit a state-of-the-art neural architecture, namely a UNet (Gao et al., 2022), such that Φ can be regarded as a projection operator. Coefficient λ balances the relative importance of the observation term and of the prior to the minimization problem.

The 4DVarNet framework derives an end-to-end neural architecture through a trainable iterative gradient-based solver for minimization (Eq.6.1). As sketched by figure 6.1,

the latter exploits automatic differentiation tools embedded in deep learning framework to feed at each iteration to a recurrent cell, namely a LSTM cell (O’Donncha et al., 2022), the gradient of variational cost (Eq.6.1) w.r.t. state x . As shown in (Fablet et al., 2021a), such trainable gradient-based schemes result in a computationally efficient minimizer using only few gradient steps, typically from 5 to 20.

6.6.1 Conditional 4DVarnets using physical forcing

In order to improve the forecasting capabilities of the model, we explore additional physical forcings, which we expect to improve the forecasting skills of the proposed 4DVar-Net schemes :

- We consider the bathymetry as a potential driver to constrain the spatial coherence of the forecasting patterns (Lazure and Dumas, 2008; Mengual, 2016) ;
- Following (Ribbe and Holloway, 2001), the tide signal appears likely to contribute to the forecasting of coastal sediment dynamics resuspension due to tidal currents ;
- Similarly, space-time wave dynamics are also expected to significantly contribute in shallow waters (agitation, orbital velocity).

From a methodological point of view, these three types of forcing refer to different space, time and space-time conditioning. We benefit from the versatility of neural approaches to extend Eq.6.1 to the following conditional formulation.

$$\hat{x} = \arg \min_x \|y - x\|_{\Omega}^2 + \lambda \|x - \Phi(x, \{\tilde{z}_l\}_l)\|^2 \quad (6.2)$$

where \tilde{z}_l is the output of encoder network to map forcing variable z_l to the a 2D tensor defined on the same grid as state x . We adapt the neural encoder to each type of forcing variable : a convolutional RNN for the bathymetry and for the the wave-induced forcing and a dense RNN encoder for the tide-related forcing. The choice of the final dimension for each forcing was defined empirically.

Experimentation were run with direct integration of forcing without any dimension reduction. This configuration need to much computational resources to converge and was not deepened.

6.6.2 Learning Scheme

Given gappy observation datasets, we state the learning of the proposed 4DVarNet schemes as the minimization of the forecasting error for the observed data for a 20-day forecasting horizon. Formally, we compute the training loss as follows :

$$\mathcal{L} = \sum_n \sum_k \|\mathbf{x}_{t_0+k}^{obs} - \hat{\mathbf{x}}_{t_0+k}\|_{\Omega_{t_0+k}}^2 \quad (6.3)$$

where $\mathbf{x}_{t_0+k}^{obs}$ is the gappy satellite observation at the time t_0+k , $\hat{\mathbf{x}}_{t_0+k}$ the gap-free forecast at the time t_0+k and Ω_{t_0+k} the observation mask at time t_0+k .

Based on the same learning dataset as in chapter 5 we consider here training losses (RMSLE and Gradient norm) evaluated on gappy data as no gap-free reference data are available. A binary mask was used to indicate to the model which data were available or not. For the trainable solver, we consider a convolution LSTM-based solver with a 45-dimensional hidden state. The architecture of the LSTM is to create an additional module in a neural network that learns when to remember and when to forget pertinent information. Meaning that an LSTM can resolve the vanish gradient problem (O’Donncha et al., 2019) characterized by the back-propagation of the long-term gradient tending to zero. The reconstruction window was set to 50 days. The first 30 days considered as observation and the last 20 as the forecasting target. For the training phase only the forecasting days were evaluated. Because of the true state is a gappy dataset, we implement a threshold of 1000 observations per day. If not, the evaluation was not realized, and the series ignored in the trained dataset selection.

Overall, the 4DVarNet-Forcing architecture involves a predefined number of iterative updates typically from 10 to 30 in the reported experiments. The batch size was set to 64 and the optimizer selected was an Adam with an evaluative learning rate from $1e^{-3}$ to $1e^{-7}$.

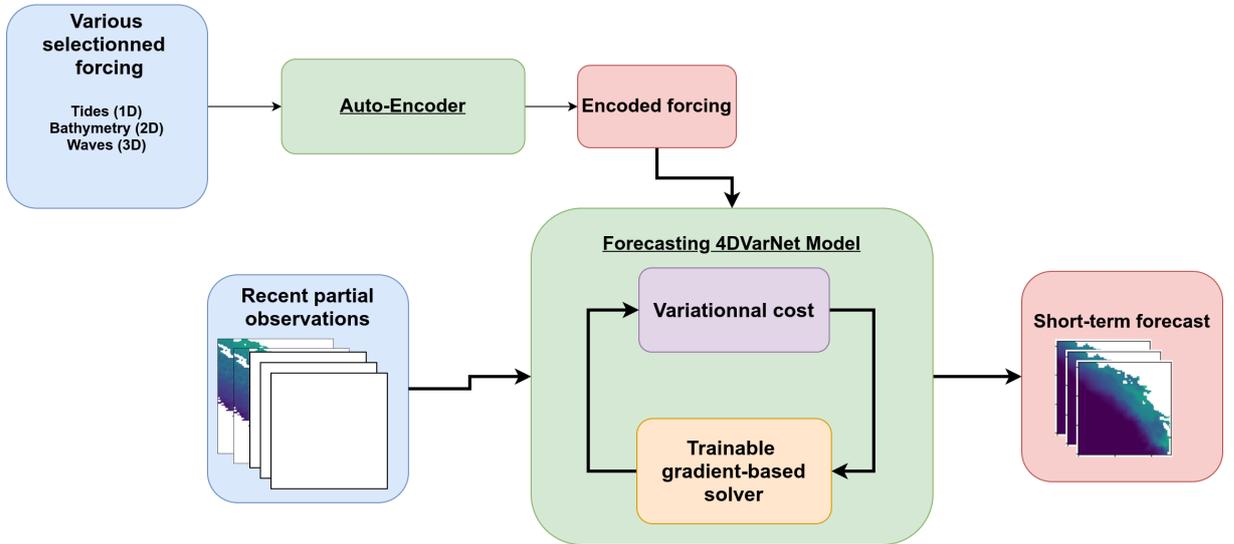


FIGURE 6.1 – Diagram of the forcing integration strategy in the 4DvarNet model. Auto-Encoder maps the considered forcings to lower-dimensionnal features fed to the 4DVarNet scheme to forecast the SSSC over a predefined horizon given past SSSC observations. NB : for simplification in the description of data pools, the Bathymetry (which is a state parameter) is included in the list of forcing parameters.

6.7 Results

This section shows the evaluation of direct forecasting for each forcing configuration (including either bathymetry and/or waves and/or tides), also including the configuration where the 4DVarNet model runs without any additional forcing. Then we are focusing on how the 4DVarNet Scheme succeeds in forecasting SSSC field values, also with their spatial gradients, in order to evaluate the ability of the method in resolving fine spatial scales.

6.7.1 Metrics and evaluation strategy

As evaluation metrics, we follow previous studies (Vient et al., 2022, 2021) and consider the root mean square error (RMSE) of the \log_{10} of concentration values :

$$RMSLE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\log_{10}(C_i^{Pred}) - \log_{10}(C_i^{Obs}))^2} \quad (6.4)$$

where C_i^{Pred} are predicted values of SSSC concentrations and C_i^{Obs} are the observed values, i stands for the index of evaluated data, n refers to the number of available observations points. We also evaluate the forecast horizon of the predicted series. The choice was made to set multiple RMSLE thresholds. Based on the EV-score, 3 levels were defined, corresponding to the number of consecutive days with more than 50%, 75% and 90% of EV. Those results are presented with violin plots. They are similar to box plot but with the density information added. While a box plot only shows summary statistics such as mean/median and inter-quartile ranges, the violin plot shows the full distribution of the data. At last we evaluate the spatial performance of the forecasts with spatial gradient. Considering the fact that it is not consistent to evaluate the gradient of the reconstruction for all the forecast series, we focus on the spatial evaluation for the first 3 days of the forecasts.

6.7.2 Global results

Tables 6.1 and 6.2 summarize the performance metrics evaluated with all configurations using satellite data without and with additional forcing in the 4DVarNet method.¹ The first Table (6.1) reports the statistical metrics for a one-day forecast, while the second Table (6.2) gives them but for a five-day forecast. For the one-day forecast the results lead to explained variances above 50% of the signal, even with the worst configuration tested (without any additional forcing). The configuration with all forcing (AF) included clearly

1. NB. Des exemples de résultats de simulations (vidéos) ont été présentés au cours de la soutenance de thèse. L'ensemble des codes et données permettant de les générer sont disponibles sur le GitHub mentionné en bas de l'article.

Waves	Forcings		Metrics		
	Bathymetry	Tides	RMSLE	EV	Bias
F	F	F	0.286	0.571	0.056
F	F	T	0.260	0.592	0.043
F	T	F	0.225	0.618	0.035
F	T	T	0.195	0.693	0.019
T	F	F	0.207	0.647	0.021
T	F	T	0.211	0.605	0.024
T	T	F	0.187	0.704	0.019
T	T	T	0.150	0.764	0.015

TABLE 6.1 – RMSLE, EV, and Bias calculated for the first day of forecast for all forcing configuration. T for True means that the forcing is integrated in the learning scheme and in the forecast input. F stands for False.

Waves	Forcings		Metrics		
	Bathymetry	Tides	RMSLE	EV	Bias
F	F	F	0.349	0.393	0.126
F	F	T	0.316	0.482	0.063
F	T	F	0.296	0.497	0.057
F	T	T	0.241	0.607	0.028
T	F	F	0.274	0.531	0.035
T	F	T	0.287	0.531	0.032
T	T	F	0.261	0.625	0.024
T	T	T	0.219	0.653	0.021

TABLE 6.2 – RMSLE, EV, and Bias calculated for the fifth days of forecast for all forcing configuration. T for True mean that the forcing is integrated in the learning scheme and in the forecast input. F stands for False.

outperformed the other ones. With respect to the no forcing (NF) configuration, with a relative gain of 40% for the RMSLE and 20% in term of EV. Compared to the second-best configuration, which is the coupled Bathymetry and Waves, the AF configuration has quite the same score in terms of RMSLE (relative gain of 4% only) and also for the EV (less than 2%). For the one-day forecast the addition of the Tides only brings little additional information. The Bathymetry forcing seems to give the most valuable information for the one-day forecast. Finally, it is noticeable that the NF configuration leads to a low forecasts performance. It does not succeed in keeping low error values when increasing the forecast range. Table 6.2, relative to the five-day forecast, raise similar conclusions, especially for the AF configuraton. With a relative gain of more than 40% in term of EV, the AF configuration again is widely better than the NF one. Therefore the gap between AF and BW (Bathymetry and Waves) configuration is larger for the five-day forecast than for the one-day forecast, 20% in term of RMSLE and 5% in terms of EV. The AF configuration appears to be more robust.

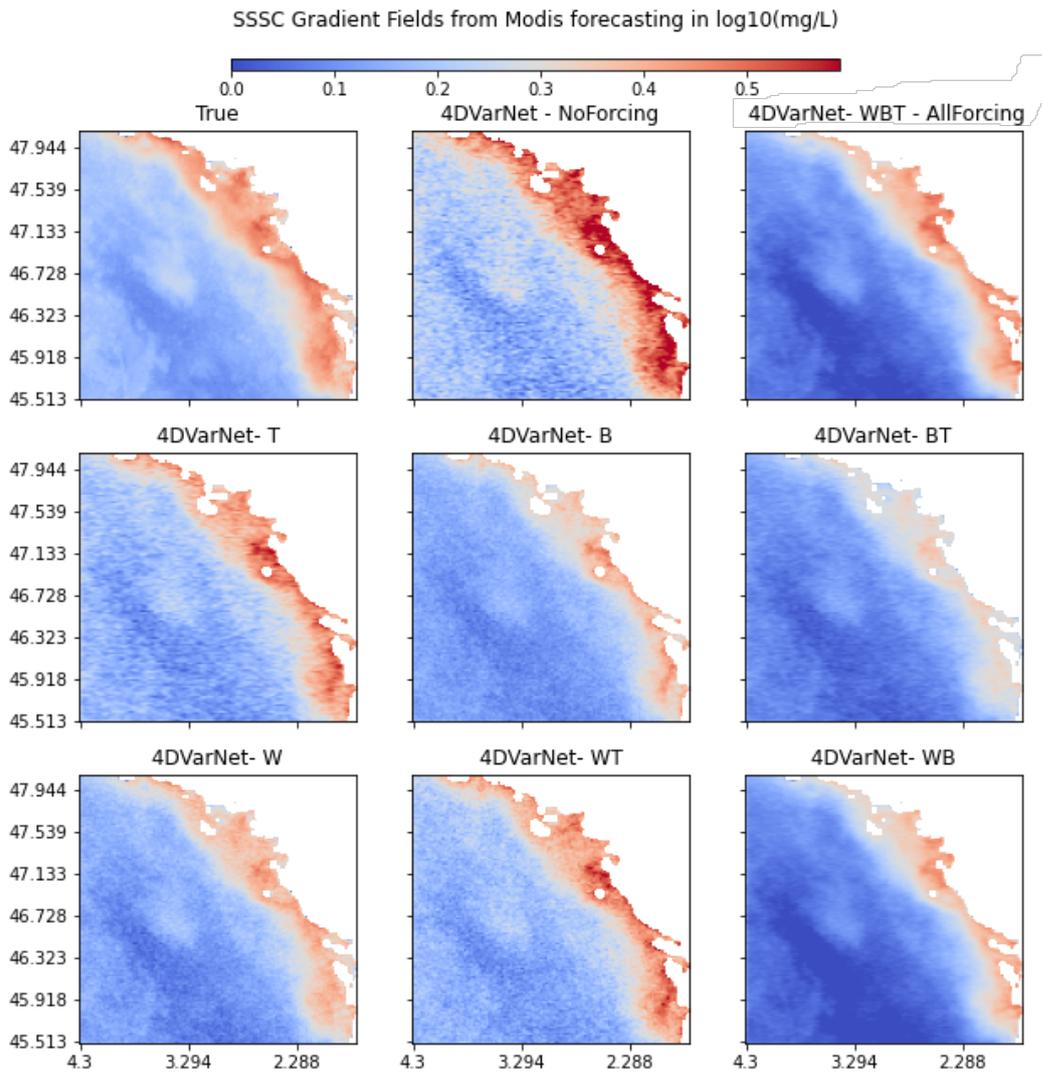


FIGURE 6.2 – Reconstruction norm of SSSC gradient fields for the first 3 days of forecast for each forcing configuration

In terms of spatial analysis, the following figure 6.2² is a representation of the spatial mean gradients calculated from X and Y for the first five days of the forecasting range. The evaluation of the forecast metrics for the gradient of the SSSC fields support the hypothesis that the improvement obtained with 4DVarNet-AF relates to a better reconstruction of fine-scale patterns. Previous works with similar 4DVarNet based architecture in interpolation context show a significant improvement of higher resolution spatial pat-

2. L'Auto-Encodeur permettant l'exploitation simultanée des forçages et paramètres intègre à la fois des données issue de modèles (biaisés et non bruités) et d'observations satellitaires (peu biaisées mais bruitées). Les solutions bruitées de 4DVarNet proviennent de cette inconsistance intrinsèque des erreurs de ces deux types de données. Les observations n'étant pas réduites avant l'input, elles ont donc une plus grande incidence sur la nature bruitée des résultats.

terns (Fablet et al., 2023; Vient et al., 2022). The mean gradient norm of 4DVarNet-AF shows some success in recovering the main front structures of the true field, compared with the other approaches. More specifically, these gradient fields depict a clearly visible contour offshore. We clearly notice, as well in the metric values, a similarity between the AF and WB configurations. Even if the WB seems to underestimate coastal SSSC values, the fine-scale patterns are well reconstructed according to the true state. Except for the W (Waves forcing) configuration, the reconstructed gradient appears to be globally lower in coastal area than the real ones, and seems quite noisy near the coast and overestimated offshore. Concerning the Tide configuration, this effect can be related to the fact that the added information is only temporal. Overestimated values and noisy patterns were also observed in the previous interpolation works. They can be related to a reconstruction issue caused by the noisy observations in the input.

6.7.3 Forcing Sensitivity

To go further in the work related to the definition of the impact of the various forcing in the simulation, several graphs are proposed. They are violin plots illustrating the forecast range performance of the model related to a certain error limit (Figure 6.3). These limits are defined according to the different levels of reconstruction quality. The first is the best hypothetical score which can be reached is 90% of EV. The second in the threshold of 75% of EV which is barely the level of satellite observation error. The last level of reconstruction considered is the stage of 50%.

The mean of forecast range, number of days for while the variance is upper than 50% of the variance of the signal, is between 3.5 and 6 days. The lowest is 3.5 days for the configuration without any forcing. Globally the scores are rather homogeneous. An explanation could be that the level of reconstruction required being low, it does not allow to clearly dissociate the results. However, the differences between the configurations are clearly visible elsewhere, especially with the quartiles. Thus in the case of the all forcing (AF) configuration, 75% of the forecasts are below 50% error over a period of 4 days and a quartile exceeds 8 days. In the case of the NF configuration, 50% of the forecasts do not exceed 4 days of reconstruction below 50% of error. Similarly, the configurations including only Tides and Waves forcings are not very efficient. The Bathymetry, on the other hand, seems to give slightly better forecasts than the other forcings with 50% of the forecasts above 4 days.

The contribution of the forcing on the quality of the accuracy is more noticeable on the number of consecutive days with more than 75% EV. The difference in median between the AF configuration and the others is more marked. Only a quartile of the days remain below the 3-day limit and the median is at 6 days. It should be noted that the first quartile of AF corresponds to the median of the second-best configuration, i.e. a gain of

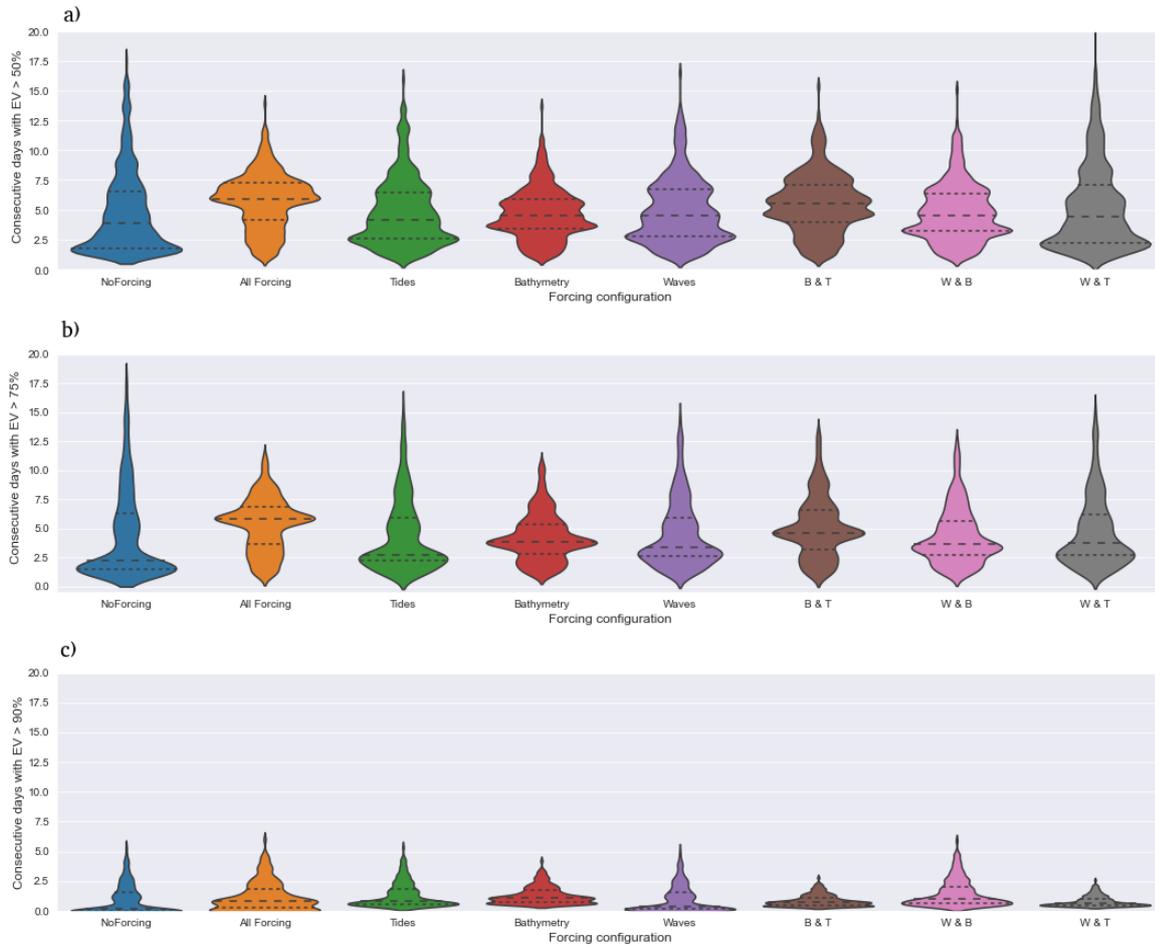


FIGURE 6.3 – Violin diagram of forecasting range performance. Each diagram refers to a specific forcings configuration. a) Evaluation of forecast horizon series above 50% of EV. b) Evaluation of forecast horizon series higher than 75% of EV c) Evaluation of forecast horizon series higher than 90% of EV.

25%. Similarly, the Bathymetry and Waves combination is close to AF in terms of results. The NF configuration starts to decline significantly from a median of 4 to less than 2.5 days, a loss of 35%.

6.7.4 Seasonality and observation rate

In the context of this work, it is difficult to evaluate the seasonal variation of predictions without addressing the question of the quantity of input observations. Indeed, as mentioned in the Section 6.4.2 about the satellite observations, the cloud cover has a large impact on the quality of observations. In order to better evaluate the impact of both season and cloud cover, two sets of graphs are proposed.

First, a series of violin diagrams allows to visualize the differences related to the seasons for the AF configuration. On this figure (6.4) are presented to the different density of prediction horizons at 50, 75 and 90% of EV. First, a clear difference is seen between the

predictions in winter and those in both summer and autumn. Winter prediction horizons are much lower than the others. On the first graph at 50% error it is possible to observe a difference in performance of about 40% between summer and winter. Such difference also is present for the other EV graphics even if it is lower.

The best results are in summer. It is also noted that the prediction horizons for summer are more stable (grouped) than for the other seasons. Spring results are close to the summer ones even if the prediction horizons are more dispersed. Finally, the two seasons achieved to have horizon to more than 90% EV. The difference with winter and spring is noticeable, more than 50% of the prediction horizons do not succeed in reaching from the first day and 75% do not exceed 1 day.

Finally, spring appears most surprising. It is similar to winter in terms of global performance for 50% and 90% EV, but maintained a higher level of performance for 75% EV. Also its density distribution displays atypical oscillation patterns.

Of course, seasonal variations can be attributed to the quantity and quality of satellite observations. In order to give more information on the importance of this link, two graphs are presented (Figure 6.5). The first one is a graph representing on one side the evolution of the rate of available data. This rate is calculated on the 30 days of past observations in input of our forecast model. There is on average 23% of available observations. The seasonal cycle is easily identifiable with a low rate of data in winter and peaks of high available data in summer. This rate is completed by the graphical projection of the prediction horizon for each reconstructed series. The plotting day corresponding to the first of the 30 days observation input. These results are presented again for the three EV thresholds. The second graph shows a cross plot between the rate of available data and the prediction horizons.

These graphs clearly show a strong correlation between the quality of the input observations and the model results. The periods corresponding to the highest observation rate are also those where the prediction horizons are the highest. This is all the more striking to see that almost no prediction range in winter, for an EV higher than 90%, exceeds 1 day. It should be noted that this correlation decreases with the required prediction quality. This can be explained by a lower level of accuracy on local events in space and time. Observations may be not numerous enough in capturing these. It is in this case that forcing can bring complementary information and allow better results.

6.8 Discussion

This study presents and evaluates a learning based prediction model derived from the 4DVarNet model (developed in the section 3.2.2) dedicated to the interpolation of derived satellite data of sea surface suspended sediment concentration. Numerical experiments with different forcing configurations are compared in order to define primary orientations

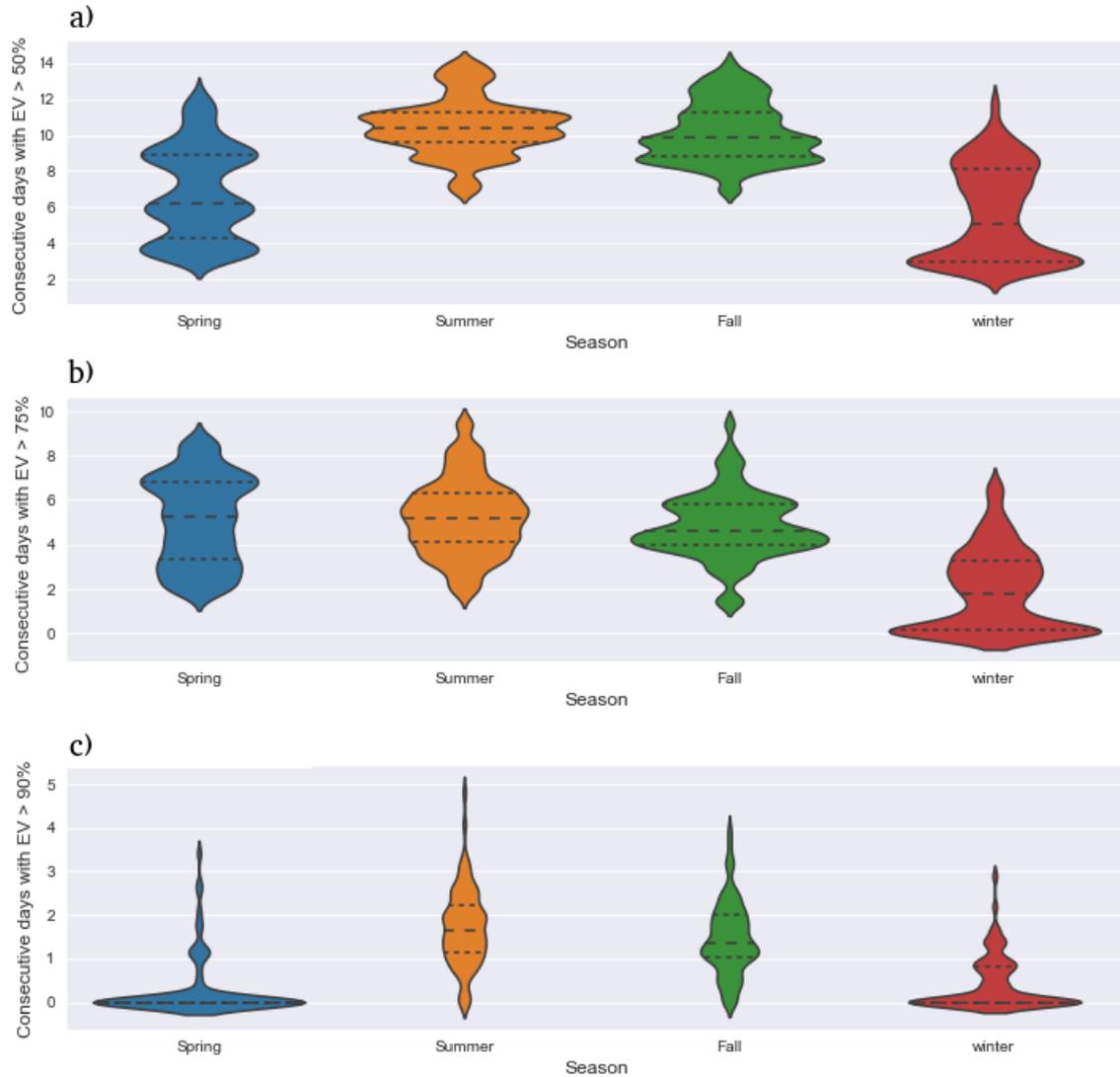


FIGURE 6.4 – Violin diagram representing the prediction horizon density for each season of the reconstructed 2010 year. a) Evaluation of prediction horizon series greater than 50% of EV b) Evaluation of prediction horizon series greater than 75% of EV c) Evaluation of prediction horizon series greater than 90% of EV.

for the future optimization of the model. The discussion below will address several important points raised in the results, namely the transition from an interpolation configuration to a prediction configuration, the input configurations and their implications, as well as on the use of neural network approaches in this type of problem solving.

6.8.1 From Interpolation to Forecast

The first work in this study was to adapt an interpolation method in order to obtain forecasts. The choice has been made as to think the forecast problem as a particular interpolation case. The case of short term forecast can be viewed as an interpolation over

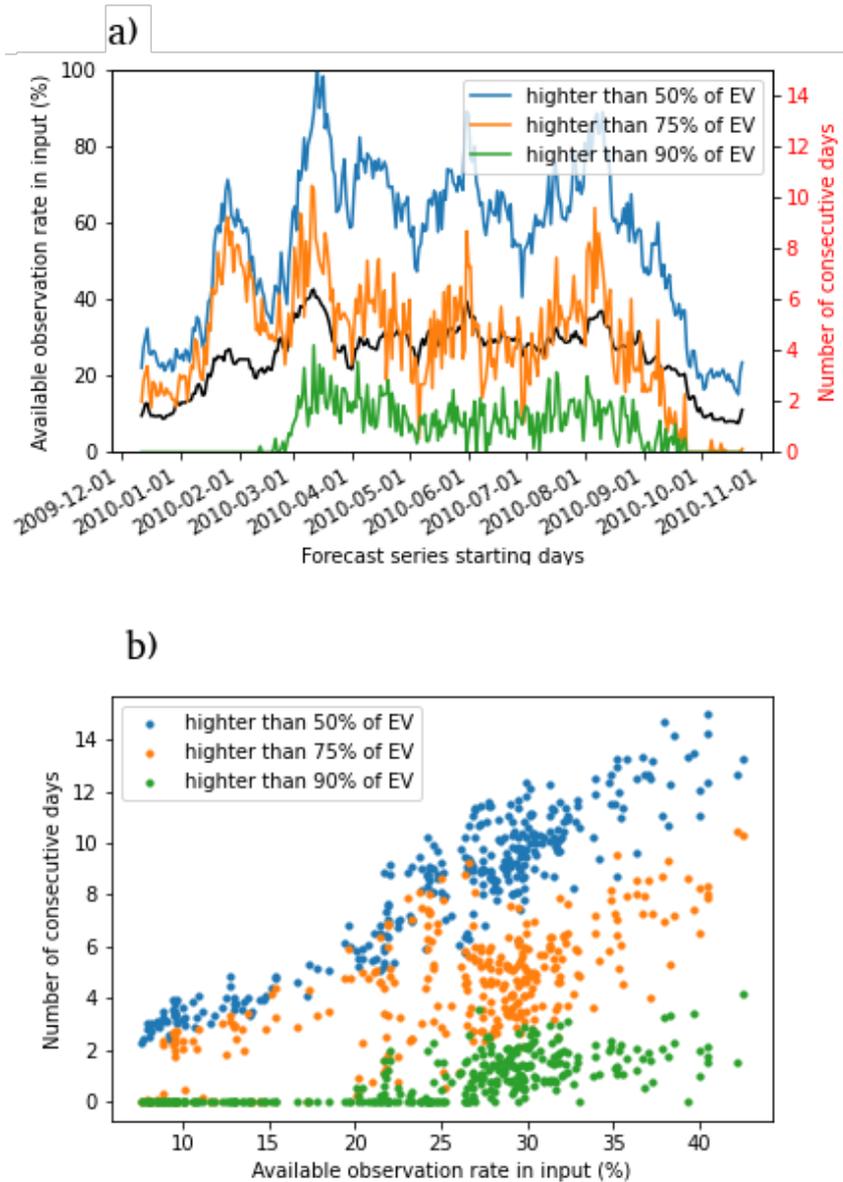


FIGURE 6.5 – a)Plot of the input available observation rate for the year of 2010 for each day compared to the horizons of forecasts calculated for each threshold of EV for the AF configuration b)Scatter plot of the forecast horizon compared to the available observation rate in input.

a complete set of missing data. The results presented in chapter 4.1.7 show that, even in the case of a restricted set of observations collected, the 4DVarNet model is able to produce relevant forecasts.

One adaptation was to change the length of the sliding time window where observation data are processed. In the case of interpolation, a slide window of 15 days was used 5.5. In the case of the forecast, this window has been extended to 30 days in order to perform a 20-day forecast (i.e. we process time series of 50 total following days, see Section 6.6).

The similarity of the methods is confirmed with the results of the first days of forecast.

That shows stability and performances similar to interpolation results. In the case of large missing data rates (the maximum duration of consecutive missing data observed is 5 days) we observe a much lower performance of the NF (No Forcing) configuration compared to the AF one (All Forcings).

As well in the interpolation configuration, the spatial dynamics is globally well reconstructed by the forecast model. The evaluation of the spatial gradients shows a similar ability of both methods (interpolation and forecast) to identify and reconstruct fairly fine events. Concerning offshore dynamics, the model is able to capture fine time variations. Closer to the coast, the dynamics have been clearly flattened in time (see figure 6.2). This phenomenon can be explained by the fact that the forcing as well as the core of the 4DVarNet interpolator is made of convolution layers based on auto-encoder architecture. This architecture is designed to solve noisy and spatially irregular problems rather than temporal ones. Also the learning ability of the model is partly based on the error associated with spatial gradients which tend to smooth field values.

On this point further tests have to be made with other configurations of input data. Also we would have to rework the architecture of the optimizer in order to include more information on the temporal gradients in order to correct this imbalance in favor of the spatial reconstruction. Work in this direction has shown that LSTMs allow good results in spatio-temporal forecasting, in particular on the SST also using a configuration based on Auto-Encoder (Hou et al., 2022; O'Donncha et al., 2022). LSTMs are widely used for sequence prediction problems and has proven to be extremely effective. The reason they work so well is that LSTM have the capacity to facilitate the classification between relevant or not data.

6.8.2 Input relevance

Other works on forecasting oceanic variables emphasize the need to have a clear understanding of the implication of additional forcing parameters (Mengual, 2016). In the field research of NN, this can be difficult to handle, and it often needs to be evaluated empirically (Bento et al., 2021; Choi et al., 2022). In this work, the addition of forcing parameters has been defined following the work of (Rivier, 2013). Indeed this previous work, based on linear regressions, demonstrated the close connection between tides, waves and the prediction of SPIM concentrations in the English Channel. The sensitivity study demonstrates that not all forcings have the same influence on data reconstruction quality, mainly applied to satellite. We propose an approach based on a work on patched images contrary to the proposed point by point calculation. In our case we also needed to add the bathymetry, which is a necessary information that is implicitly included in the pixel-wise regressions defined by Rivier (2013).

Our objective here was to evaluate the contribution of each forcing parameter in or-

der to better define future configurations using NN models applied to various datasets. Concerning the training data, it has already been shown that given the rate of available data, the data set of 10 years of partial satellite observations allowed sufficient information for our working scales. Final results show that the Bathymetry has the major impact on the forecast performance. This appears obvious knowing that resuspension processes seen at the ocean surface mainly depends on the height of the water column. Moreover, because of the bathymetry, the forcing will not have the same impact according to its geomorphology. Also the global dynamics of particles, in going from land to the open ocean, induces higher turbid waters along the coasts. However, water turbidity also depends on the bottom sediment content. Therefore, sea bottom sedimentology charts may be of value and should probably be added into the processing system in future experiments. Meanwhile, present results show that Waves have a second major impact on the forecast performance. This could be explained as well while looking to the time series and noticing that the main turbidity intra-annual variability in the Bay of Biscay appears in winter with storms coming, the latter usually being quite strong in this area. Finally, the Tides appear to be of the last importance. Indeed, tides could be seen as a modulation of the main previous signals. In order to improve the relevance of tidal forcing, the river discharge input can be added to the forcing features. And we must not forget that the tidal signal is already included, partly at least, in the satellite data (while during storms, when Waves are intense, satellite data are usually missing because of the cloud cover).

These learning observations were completed by forcing added in the model through a first data resizing. Indeed, preliminary experiments trying to include the forcing directly required too much computational resources for average results. The choices of dimension reduction were also made by successive attempts (Section 6.6).

In terms of methodology, it is possible to discuss two important aspects. The first concerns the type of CNN or RNN used to reduce the information and interpretation given by the model. In the first place, the Bathymetry gives results that are better than the other forcing alone. Several interpretations are possible. First the Bathymetry is reduced with a CNN model based on a CNN encoder. It is well known that these models are particularly well suited for dimension reduction of 2D or 3D spatial data (Firat et al., 2022; Velliangiri et al., 2019). Moreover the bathymetry is a static field (constant with time). Therefore, it is possible to consider this information to have a constant noise and bias in the calculation. Also, given the fact that inputs are incomplete, the learning phase is not always in a situation with a good amount of data spatially clustered. By completing with information on the position relative to the coast, the system is able to adjust the reconstructions more easily in space. A remarkable point about the addition of waves information in the model is the ability to obtain extreme and punctual levels of reconstruction, as shown in the figure below figure 6.3, where the Waves allow reconstructions of more than 15 days with more than 75% of EV. However, further work is needed to verify whether or not

the Waves, which are much more intense in winter, allow viable reconstructions following lengthy missing observations. Adding the Tide presents less convincing results. From a methodological point of view, the RNN used to reduce the one-dimensional temporal series seems the best choice. The problem may lie in the optimization of the model, based on a spatial gradient optimization, which may cause a reduction in the importance given by the tidal coefficient. It should be noted, however, that, coupled with the Waves, the Tides give satisfactory results, especially on the reconstruction with more than 90% EV.

Finally, we did not observe over-fitting problems and the addition of Forcings into the system led to systematically better reconstructions. However the violin boxes show that the AF configuration is not necessarily the best in terms of maximum prediction horizon. A hypothesis on this fact is that the addition of the set of Forcings can lead to a kind of smoothing of the signal not allowing to reach extreme cases and/or short scales in time and space. In spite of the fact that the spatial gradients can be reconstructed in a rather fine way, the lack of temporal correlation, mentioned above, may be at the origin of these results.

6.9 Conclusion

This study presented an adaptation of the 4DVarNet end-to-end neural scheme for the space-time forecast of SSSC fields. Following some previous work with encouraging result with interpolations of observation, learning with observation. The NN was evaluated in a forecasting approach completed by the inclusion of oceanic forcing in the learning and forecasting architecture. For the sea surface parameter forecasting, this study is of some which try to setting up forecasts with NN-based architecture.

In addition to further refinement of the proposed architecture, it is possible to add more relevant forcing with the required forecast. Some key parameters of the SSSC dynamics can be added to the initial dataset like discharges from the main rivers and wind model outputs. The variational formulation of 4DVarNet tends to be more robust with more information added. Then this type of study can be the start of a better understanding of physical forcing influence on oceanic surface variables. The ability to train a new model configuration faster than classical data assimilation process can be the start of an extensive forcing sensitivity study.

6.10 Material

The computer code and dataset for this study can be found in the <https://github.com/Jvient/4DVarNet-Forecast>.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Mon travail de thèse était d'étudier le potentiel et les limitations des techniques d'interpolation pour mieux caractériser l'évolution spatio-temporelle des matières non-algales en suspension à la surface de l'océan. Les dynamiques associées sont liées à de nombreux facteurs environnementaux et anthropiques si bien que les moyens de quantifier la turbidité deviennent vite complexes. Des mesures directes (*in-situ*) sont possibles, mais sont coûteuses et ne permettent pas de couvrir une zone très importante. Les modèles hydrosédimentaires proposent une capacité de reconstruction des informations de surface, et aussi en profondeur, mais au prix d'un coup de calcul élevé et d'approximation physiques dans les équations de reconstruction. Les observations satellites, elles, souffrent principalement de la couverture nuageuse, et sont aveugles en profondeur. Pour pallier ces problèmes, nous avons appliqué ici aux mesures satellites des méthodes basées sur des réseaux de neurones et leurs capacité à résoudre des problèmes de données manquantes.

Nous avons appliqué ces techniques dans le cas du golfe de Gascogne qui est l'environnement idéal, car bien connu de la communauté océanologique française, pour mettre à l'épreuve les modèles de reconstruction de la dynamique des particules en suspension. De par sa situation, le GdG est sujet aux dynamiques côtières d'influence plus distales. Les apports fluviaux induisent des dynamiques fortes sur le système et influencent fortement le signal saisonnier. La bathymétrie du GdG est très variée et propose des reliefs côtiers importants dans lesquels la dynamique est particulièrement importante. Il possède également un talus donnant sur une plaine abyssale plus faible en dynamique de surface (de l'océan). Enfin les produits disponibles sont assez variés et en assez grande quantité pour pouvoir être utilisés dans le cadre de cette étude de reconstruction dirigées par la donnée.

Différentes méthodes de reconstruction de données ont été envisagées pour répondre à la problématique. Ces différentes approches ont été décrites et définies mathématiquement. Les méthodes de géostatistiques comme l'OI faisant office de référence, d'autres méthodes tirant profit de jeux de données toujours plus importants permettent de proposer des schémas de résolution plus complexes. Elles peuvent être basées sur des applications linéaires de données considérées comme vraies à l'image du DinEOF. Cette présentation a été complétée par la description des méthodes d'assimilation de données, plus complexes dans leur application, mais utilisant plus d'informations pour résoudre les problématiques d'interpolation. Enfin, l'approche variationnelle, majeure dans ce travail a été décrite et illustrée par le 4DVar. Pour terminer, une introduction au réseau de neurones a montré

leur souplesse pour résoudre des problèmes de régression. A été ensuite présentée l'architecture principale de la méthode 4DVarNet, qui permet de proposer un 4DVar augmenté par les capacités de calculs d'un réseaux de neurones et qui est la méthode d'application principale de ce travail.

Nous avons démontré la capacité des réseaux de neurones à surpasser les méthodes conventionnelles sur ce type de problématiques. La méthode 4DVarNet montre en effet des gains relatifs importants par rapport aux méthodes plus classiques de reconstruction d'observations satellites. En particulier il est à noter des performances accrues sur les gradients spatiaux, notamment grâce à l'approche variationnelle qui permet une meilleure définition des échelles les plus fines, démontrant la capacité des réseaux de neurones à proposer des produits satellites complets en termes de temps et d'espaces à partir des seules observations.

Par ailleurs, les propriétés de l'approche variationnelle du 4DVarNet ont été configurées pour proposer des prédictions journalières de la SSSC à court terme. Conservant la stratégie d'apprentissage sur les observations satellites sans interpolation, le modèle a cependant été augmenté avec l'utilisation de forçages océaniques. Ces forçages ont permis d'améliorer significativement les performances de reconstruction. L'étude de sensibilité a permis de mettre en valeur l'importance des informations de bathymétrie et de vagues pour la stabilité des reconstructions au détriment des informations sur la marée. Ce travail est ainsi une évolution de l'approche proposée par Rivier (2013) en utilisant des régression linéaires entre le paramètre recherché (turbidités) et ces même forçages.

Les travaux présentés n'ont pas la 'prétention' de montrer une méthode aboutie. En effet la méthode 4DVarNet au-delà de ses performances est une méthode très modulable et de nombreuses configurations restent à évaluer. Elle montre cependant qu'il est possible d'utiliser les méthodes de réseaux de neurones avec succès pour des problématiques de reconstruction d'observations satellites. Cependant, les performances de ces NN sont très fortement liées aux informations initiales qui permettent de mettre en place l'apprentissage, qu'elles soient issues de mesures, d'observations ou de modèles. Dans ce contexte le réseau de neurones se place comme un super agrégateur de données capable de combiner des approches de sources multiples pour améliorer la compréhension d'un système. S'intégrant parfaitement à la philosophie de l'assimilation de données les réseaux de neurones permettront à l'avenir des avancées majeures dans le domaine des sciences océaniques.

Les perspectives directes de ce travail peuvent être envisagées sur plusieurs grands axes. Le premier est celui de la performance d'interpolation. En effet, la configuration avec forçage n'a jamais été évaluée en contexte d'interpolation pour cette reconstruction de SSSC. Des résultats très encourageants ont cependant été obtenus avec de la reconstruction de SST (Beauchamp et al., 2020). Ensuite l'étude des forçages en contexte de

prévision n'est encore qu'au début de sa caractérisation. Plusieurs forçages de second ordre de la dynamique des SSSC, notamment les informations de vent, pourraient être évalués. Concernant l'importance des observations satellites, de récents travaux ont proposé des approches basées sur des NN permettant d'avoir une vision sur les zones nécessitant davantage d'informations pour améliorer la reconstruction des données (Daw et al., 2022). Ainsi un réseau de neurones de reconstruction de données serait capable d'indiquer les zones les plus importantes à renseigner pour améliorer la qualité la reconstruction. Cela permettrait d'optimiser les réseaux d'observations en programmant des mesures spatialisées en amont. Enfin, le dernier point sur lequel des travaux complémentaires seraient attendus est le volet des incertitudes. En effet, il s'agit d'une composante importante des problématiques de prévision et cet aspect n'a pas été exploré en profondeur dans ce travail. Il s'agit d'un des avantages notoires de la méthode 4DVar et son implémentation dans le 4DVarNet compléterait leurs souplesse d'utilisation. Plusieurs pistes sont envisageables, mais la plus probable serait de mettre en place un modèle de propagation des erreurs dans le modèle et de suivre son évolution dans le système (Gao et al., 2022; Kabir et al., 2018).

BIBLIOGRAPHIE

- Allard, R., Barron, C., Blain, C. A., Hogan, P., Keen, T., Smedstad, L., Wallcraft, A., Berger, C., Howington, S., Smith, J., Signell, R., Bettencourt, M., and Cobb, M. (2003). High Fidelity Simulations of Littoral Environments. page 16.
- Alvera-Azcárate, A., Barth, A., Rixen, M., and Beckers, J. M. (2005). Reconstruction of incomplete oceanographic data sets using empirical orthogonal functions : Application to the Adriatic Sea surface temperature. *Ocean Modelling*, 9(4) :325–346.
- Alvera-Azcárate, A., Barth, A., Sirjacobs, D., and Beckers, J.-M. (2009). Enhancing temporal correlations in eof expansions for the reconstruction of missing data using dineof. *Ocean Science*, 5(4) :475–485.
- Alvera-Azcárate, A., Vanhellemont, Q., Ruddick, K., Barth, A., and Beckers, J. M. (2015). Analysis of high frequency geostationary ocean colour data using DINEOF. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*.
- Antoine, D. (2016). *GeOCAPI Geostationary Ocean Colour Advanced Permanent Imager Full mission proposal in response to the ESA call for the 9th Earth Explorer Mission (EE-9)*, volume 1. : ESA, esa edition.
- Ao, D., Luo, L., Dzakpasu, M., Chen, R., Xue, T., and Wang, X. C. (2018). Replenishment of landscape water with reclaimed water : Optimization of supply scheme using transparency as an indicator. *Ecological Indicators*, 88 :503–511.
- Ardhuin, F., Chapron, B., and Collard, F. (2009a). Observation of swell dissipation across oceans. *Geophysical Research Letters*, 36(6) :1–5.
- Ardhuin, F., Marié, L., Rasclé, N., Forget, P., and Roland, A. (2009b). Observation and estimation of lagrangian, stokes, and Eulerian currents induced by wind and waves at the sea surface. *Journal of Physical Oceanography*, 39(11) :2820–2838.
- Barth, A., Alvera-Azcárate, A., Licer, M., and Beckers, J. M. (2020a). DINCAE 1.0 : A convolutional neural network with error estimates to reconstruct sea surface temperature satellite observations. *Geoscientific Model Development*, 13(3) :1609–1622.
- Barth, A., Alvera-Azcárate, A., Licer, M., and Beckers, J. M. (2020b). DINCAE 2.0 : A convolutional neural network with error estimates to reconstruct sea surface temperature satellite observations. *Geoscientific Model Development*, 13(3) :1609–1622.

- Barth, A., Azcárate, A. A., Joassin, P., Beckers, J.-M., and Troupin, C. (2008). Statistical Analysis of Biological data and Times-Series Introduction to Optimal Interpolation and Variational Analysis Theory of optimal interpolation and variational analysis Contents. In *Statistical Analysis of Biological data and Times-Series*, chapter 1.
- Batifoulier, F., Kervella, Y., Laborde, R., Cuny, J., Caillaud, M., Lazure, P., and Cayocca, F. (2012). Impact hydrodynamique de la mise en place d’un parc d’hydroliennes en Baie du Mont Saint-Michel. pages 809–818.
- Beauchamp, M., Fablet, R., Ubelmann, C., Ballarotta, M., and Chapron, B. (2020). Inter-comparison of data-driven and learning-based interpolations of along-track nadir and wide-swath swot altimetry observations. *Remote Sensing*, 12(22) :1–29.
- Beckers, J. M. and Rixen, M. (2003). EOF calculations and data filling from incomplete oceanographic datasets. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 20(12) :1839–1856.
- Bellacicco, M., Cornec, M., Organelli, E., Brewin, R. J., Neukermans, G., Volpe, G., Barbieux, M., Poteau, A., Schmechtig, C., D’Ortenzio, F., Marullo, S., Claustre, H., and Pitarch, J. (2019). Global Variability of Optical Backscattering by Non-algal particles From a Biogeochemical-Argo Data Set. *Geophysical Research Letters*, 46(16) :9767–9776.
- Bénard, P. (2003). Aladin-NH / AROME dynamical core : status and possible extension to IFS. *Proceedings of the ECMWF Seminar*.
- Bento, P. M., Pombo, J. A., Mendes, R. P., Calado, M. R., and Mariano, S. J. (2021). Ocean wave energy forecasting using optimised deep learning neural networks. *Ocean Engineering*, 219(December 2020) :108372.
- Berni, C. (2011). Processus de mobilisation et de transport de sédiments dans la zone de déferlement. page 249.
- BERTIN, X. and DODET, G. (2010). Variabilité du climat de houle dans le Golfe de Gascogne au cours des six dernières décennies. (January) :35–44.
- Bertino, L. and Evensen, G. (2003). Sequential data assimilation techniques in oceanography. *International Statistical . . .*, pages 1–40.
- Bishop (1994). Neural networks and their applications. *American Institute of Physics*, 65(6) :1803.
- Borja, A., Amouroux, D., Anschutz, P., Gómez-Gesteira, M., Uyarra, M. C., and Valdés, L. (2018). *The bay of biscay*. Elsevier Ltd., second edi edition.

- Borja, Á., Elliott, M., Carstensen, J., Heiskanen, A. S., and van de Bund, W. (2010). Marine management - Towards an integrated implementation of the European marine strategy framework and the water framework directives. *Marine Pollution Bulletin*, 60(12) :2175–2186.
- Boudière, E., Maisondieu, C., Ardhuin, F., Accensi, M., Pineau-Guillou, L., and Lepageur, J. (2013). A suitable metocean hindcast database for the design of Marine energy converters. *International Journal of Marine Energy*, 3-4 :40–52.
- Bowers, D. G. and Binding, C. E. (2006). The optical properties of mineral suspended particles : A review and synthesis. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 67(1-2) :219–230.
- Boyce, D. G., Lewis, M. R., and Worm, B. (2010). Global phytoplankton decline over the past century. *Nature*.
- Brand, E., Chen, M., and Montreuil, A. L. (2020). Optimizing measurements of sediment transport in the intertidal zone. *Earth-Science Reviews*, 200(September 2018).
- Castaing, P., Froidefond, J. M., Lazure, P., Weber, O., Prud’Homme, R., and Jouanneau, J. M. (1999). Relationship between hydrology and seasonal distribution of suspended sediments on the continental shelf of the Bay of Biscay. *Deep-Sea Research Part II : Topical Studies in Oceanography*, 46(10) :1979–2001.
- Chao, S.-Y. U. o. M. (1988). Wind-Driven Motion of Estuarine Plumes. *Journal of Physical Oceanography*, 18 :1144–1166.
- Chapman, D. C. and Lentz, S. J. (1993). Trapping of a Coastal Density Front by the Bottom Boundary Layer. *Journal of Physical Oceanography*, 24 :1464–1479.
- Chen, G., Fablet, R., Lguensat, R., Huynh Viet, P., Sun, M., Fenglin, T., and Chapron, B. (2017). Data-driven Interpolation of Sea Level Anomalies using Analog Data Assimilation. Technical report.
- Choi, Y., Park, Y., Hwang, J., Jeong, K., and Kim, E. (2022). Improving Ocean Forecasting Using Deep Learning and Numerical Model Integration. *Journal of Marine Science and Engineering*, 10(4).
- Cocquempot, L., Delacourt, C., Paillet, J., Riou, P., Aucan, J., Castelle, B., Charria, G., Claudet, J., Conan, P., Coppola, L., Hocdé, R., Planes, S., Raimbault, P., Savoye, N., Testut, L., and Vuillemin, R. (2019). Coastal ocean and nearshore observation : A French case study. *Frontiers in Marine Science*, 6(JUN) :1–17.
- Cressie, N. A. C. and Wikle, C. K. (2011). *Statistics for spatio-temporal data*. Wiley.

- Daley, R. (1997). Atmospheric data Assimilation. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75(1B) :319–329.
- Damveld, J. H., Roos, P. C., Borsje, B. W., and Hulscher, S. J. (2019). *Modelling the two-way coupling of tidal sand waves and benthic organisms : a linear stability approach*, volume 19. Springer Netherlands.
- Daw, A., Bu, J., Wang, S., Perdikaris, P., and Karpatne, A. (2022). Rethinking the Importance of Sampling in Physics-informed Neural Networks. pages 1–34.
- de Souza Machado, A. A., Spencer, K., Kloas, W., Toffolon, M., and Zarfl, C. (2016). Metal fate and effects in estuaries : A review and conceptual model for better understanding of toxicity. *Science of the Total Environment*, 541 :268–281.
- Deschamps, P. Y., Herman, M., and Tanre, D. (1983). Modeling of the atmospheric effects and its application to the remote sensing of ocean color. *Appl. Opt.*, 22(23) :3751–3758.
- Diaz, M., Grasso, F., Le Hir, P., Sottolichio, A., Caillaud, M., and Thouvenin, B. (2020). Modeling Mud and Sand Transfers Between a Macrotidal Estuary and the Continental Shelf : Influence of the Sediment Transport Parameterization. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 125(4) :1–37.
- Doray, M., Petitgas, P., Romagnan, J. B., Huret, M., Duhamel, E., Dupuy, C., Spitz, J., Authier, M., Sanchez, F., Berger, L., Dorémus, G., Bourriau, P., Grellier, P., and Massé, J. (2018). The PELGAS survey : Ship-based integrated monitoring of the Bay of Biscay pelagic ecosystem. *Progress in Oceanography*, 166(xxxx) :15–29.
- Druine, F. (2018). Flux sédimentaire en estuaire de Seine : quantification et variabilité multi-échelle sur la base de mesure de turbidité (réseau SYNAPSES).
- Dubrulle, C., Jouanneau, J. M., Lesueur, P., Bourillet, J. F., and Weber, O. (2007). Nature and rates of fine-sedimentation on a mid-shelf : "La Grande Vasière" (Bay of Biscay, France). *Continental Shelf Research*, 27(16) :2099–2115.
- Durrieu De Madron, X., Ferré, B., Le Corre, G., Grenz, C., Conan, P., Pujo-Pay, M., Buscail, R., and Bodiot, O. (2005). Trawling-induced resuspension and dispersal of muddy sediments and dissolved elements in the Gulf of Lion (NW Mediterranean). *Continental Shelf Research*, 25(19-20) :2387–2409.
- Duvert, C., Gratiot, N., Evrard, O., Navratil, O., Némery, J., Prat, C., and Esteves, M. (2010). Drivers of erosion and suspended sediment transport in three headwater catchments of the Mexican Central Highlands. *Geomorphology*, 123(3-4) :243–256.

- Eleveld, M. A., Pasterkamp, R., van der Woerd, H. J., and Pietrzak, J. D. (2008). Remotely sensed seasonality in the spatial distribution of sea-surface suspended particulate matter in the southern North Sea. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 80(1) :103–113.
- Elliott, M., Borja, Á., McQuatters-Gollop, A., Mazik, K., Birchenough, S., Andersen, J. H., Painting, S., and Peck, M. (2015). Force majeure : Will climate change affect our ability to attain Good Environmental Status for marine biodiversity? *Marine Pollution Bulletin*, 95(1) :7–27.
- Fablet, R., Beauchamp, M., Drumetz, L., and Rousseau, F. (2021a). Joint Interpolation and Representation Learning for Irregularly Sampled Satellite-Derived Geophysical Fields . *Frontiers in Applied Mathematics and Statistics*, 7(May) :1–13.
- Fablet, R., Chapron, B., Drumetz, L., Mémin, E., Pannekoucke, O., and Rousseau, F. (2021b). Learning Variational Data Assimilation Models and Solvers. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 13(10) :1–15.
- Fablet, R., Febvre, Q., and Chapron, B. (2023). Multimodal 4DVarNets for the reconstruction of sea surface dynamics from SST-SSH synergies. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, pages 1–17.
- Fablet, R., Viet, P. H., and Lguensat, R. (2017). Data-driven Models for the Spatio-Temporal Interpolation of satellite-derived SST Fields. *IEEE Transactions on Computational Imaging*, 3(4) :647–657.
- Fablet, R., Viet, P. H., Lguensat, R., Horrein, P. H., and Chapron, B. (2018). Spatio-temporal interpolation of cloudy SST fields using conditional analog data assimilation. *Remote Sensing*, 10(2).
- Ferré, B., Durrieu de Madron, X., Estournel, C., Ulses, C., and Le Corre, G. (2008). Impact of natural (waves and currents) and anthropogenic (trawl) resuspension on the export of particulate matter to the open ocean. Application to the Gulf of Lion (NW Mediterranean). *Continental Shelf Research*, 28(15) :2071–2091.
- Firat, H., Asker, M. E., and Hanbay, D. (2022). Classification of hyperspectral remote sensing images using different dimension reduction methods with 3D/2D CNN. *Remote Sensing Applications : Society and Environment*, 25(January) :100694.
- Gao, Y., Guan, J., Zhang, F., Wang, X., and Long, Z. (2022). Attention-Unet-Based Near-Real-Time Precipitation Estimation from Fengyun-4A Satellite Imageries. *Remote Sensing*, 14(12) :2925.
- Garvine, R. W. U. o. D. (1987). Estuary plumes and front in shelf waters a layer model. *American Meteorological Society*, 17 :1877–1896.

- Gibbs, R. J. and Wolanski, E. (1992). The effect of flocs on optical backscattering measurements of suspended material concentration. *Marine Geology*, 107(4) :289–291.
- Gohin, F. (2011). Annual cycles of chlorophyll-a, non-algal suspended particulate matter, and turbidity observed from space and in-situ in coastal waters. *Ocean Science*, 7(5) :705–732.
- Gohin, F., Bryère, P., Lefebvre, A., Sauriau, P. G., Savoye, N., Vantrepotte, V., Bozec, Y., Cariou, T., Conan, P., Coudray, S., Courtay, G., Françoise, S., Goffart, A., Fariñas, T. H., Lemoine, M., Piraud, A., Raimbault, P., and Rétho, M. (2020). Satellite and in situ monitoring of chl-a, turbidity, and total suspended matter in coastal waters : Experience of the year 2017 along the french coasts. *Journal of Marine Science and Engineering*, 8(9) :1–25.
- Gohin, F., Loyer, S., Lunven, M., Labry, C., Froidefond, J. M., Delmas, D., Huret, M., and Herbland, A. (2005). Satellite-derived parameters for biological modelling in coastal waters : Illustration over the eastern continental shelf of the Bay of Biscay. *Remote Sensing of Environment*.
- Gohin, F., Saulquin, B., and Bryere, P. (2010). Atlas de la Température, de la concentration en Chlorophylle et de la Turbidité de surface du plateau continental français et de ses abords de l’Ouest européen. (January) :53.
- Gohin, F., Saulquin, B., Oger-Jeanneret, H., Lozac’h, L., Lampert, L., Lefebvre, A., Riou, P., and Bruchon, F. (2008). Towards a better assessment of the ecological status of coastal waters using satellite-derived chlorophyll-a concentrations. *Remote Sensing of Environment*.
- Gordon, H. R. (1973). Simple Calculation of the Diffuse Reflectance of the Ocean. Technical report.
- Gordon, H. R. and Morel, A. Y. (2012). Remote assessment of ocean color for interpretation of satellite visible imagery : a review.
- Gorokhovich, Y. (2016). Turbidity. *Encyclopedia of Earth Sciences Series*, 1 :720–721.
- Grasso, F., Verney, R., Le Hir, P., Thouvenin, B., Schulz, E., Kervella, Y., Khojasteh Pour Fard, I., Lemoine, J. P., Dumas, F., and Garnier, V. (2018). Suspended Sediment Dynamics in the Macrotidal Seine Estuary (France) : 1. Numerical Modeling of Turbidity Maximum Dynamics. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 123(1) :558–577.
- Grochowski, N. T. L., Collins, M. B., Boxall, S. R., Salomon, J. C., Breton, M., and Lafite, R. (1993). Sediment transport pathways in the eastern English Channel. *Oceanologica Acta*, 16(5-6) :531–537.

- Guillou, N., Rivier, A., Chapalain, G., and Gohin, F. (2017). The impact of tides and waves on near-surface suspended sediment concentrations in the English Channel. *Oceanologia*, 59(1) :28–36.
- Guo, X., Liu, X., Zhu, E., and Yin, J. (2017). Deep Clustering with Convolutional Autoencoders. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 10635 LNCS :373–382.
- Gusarov, A. and Kalyuzhnaya, A. (2017). Spatially adaptive ensemble optimal interpolation of in-situ observations into numerical vector field models. *Procedia Computer Science*, 119 :325–333.
- Haalboom, S., de Stigter, H., Duineveld, G., van Haren, H., Reichart, G. J., and Mienis, F. (2021). Suspended particulate matter in a submarine canyon (Whittard Canyon, Bay of Biscay, NE Atlantic Ocean) : Assessment of commonly used instruments to record turbidity.
- Halliwell, G. R., Mehari, M. F., Le Hénaff, M., Kourafalou, V. H., Androulidakis, I. S., Kang, H. S., and Atlas, R. (2017). North Atlantic Ocean OSSE system : Evaluation of operational ocean observing system components and supplemental seasonal observations for potentially improving tropical cyclone prediction in coupled systems. *Journal of Operational Oceanography*, 10(2) :154–175.
- He, L., Fablet, R., Chapron, B., and Tournadre, J. (2015). Learning-Based Emulation of Sea Surface Wind Fields from Numerical Model Outputs and SAR Data. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*.
- He, X., Bai, Y., Pan, D., Huang, N., Dong, X., Chen, J., Chen, C. T. A., and Cui, Q. (2013). Using geostationary satellite ocean color data to map the diurnal dynamics of suspended particulate matter in coastal waters.
- Hewitt, H. T., Bell, M. J., Chassignet, E. P., Czaja, A., Ferreira, D., Griffies, S. M., Hyder, P., McClean, J. L., New, A. L., and Roberts, M. J. (2017). Will high-resolution global ocean models benefit coupled predictions on short-range to climate timescales? *Ocean Modelling*, 120(October) :120–136.
- Hoffman, R. N. and Atlas, R. (2016). Future observing system simulation experiments. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 97(9) :1601–1616.
- Hou, S., Li, W., Liu, T., Zhou, S., Guan, J., Qin, R., and Wang, Z. (2022). MUST : A Multi-source Spatio-Temporal data fusion Model for short-term sea surface temperature prediction. *Ocean Engineering*, 259 :1–16.

- Høyer, J. L. and She, J. (2007). Optimal interpolation of sea surface temperature for the North Sea and Baltic Sea. *Journal of Marine Systems*.
- Huthnance, J., Hopkins, J., Berx, B., Dale, A., Holt, J., Hosegood, P., Inall, M., Jones, S., Loveday, B. R., Miller, P. I., Polton, J., Porter, M., and Spingys, C. (2022). Ocean shelf exchange, NW European shelf seas : Measurements, estimates and comparisons. *Progress in Oceanography*, 202(April 2021) :102760.
- Huthnance, J. M., Van Aken, H. M., White, M., Barton, E. D., Le Cann, B., Coelho, E. F., Alvarez Fanjul, E., Miller, P., and Vitorino, J. (2002). Ocean margin exchange - Water flux estimates. *Journal of Marine Systems*, 32(1-3) :107–137.
- Irabien, M. J., Cearreta, A., Gómez-Arozamena, J., Gardoki, J., and Martín-Consuegra, A. F. (2020). Recent coastal anthropogenic impact recorded in the Basque mud patch (southern Bay of Biscay shelf).
- Jafar-Sidik, M., Gohin, F., Bowers, D., Howarth, J., and Hull, T. (2017). The relationship between Suspended Particulate Matter and Turbidity at a mooring station in a coastal environment : consequences for satellite-derived products. *Oceanologia*, 59(3) :365–378.
- James, I. D. (2002). Modelling pollution dispersion, the ecosystem and water quality in coastal waters : A review. *Environmental Modelling and Software*, 17(4) :363–385.
- Jerlov, . (1977). *Marine Optics*, volume 31. : Elsevier Scientific Publishing Compan, elsevier o edition.
- Jin, D., Lee, E., Kwon, K., and Kim, T. (2021). A Deep Learning Model Using Satellite Ocean Color and Hydrodynamic Model to Estimate Chlorophyll- a Concentration.
- Jonsson, I. (1966). WAVE BOUNDARY LAYERS AMD FRICTION FACTORS. *Coastal Engineering 1966 . 1967*, (M) :127–148.
- Kabir, H. M., Khosravi, A., Hosen, M. A., and Nahavandi, S. (2018). Neural Network-Based Uncertainty Quantification : A Survey of Methodologies and Applications. *IEEE Access*, 6 :36218–36234.
- Kalnay, E., Collins, W., Deaven, D., Gandin, L., Iredell, M., Jenne, R., and Joseph, D. (1996). The NCEP NCAR 40-year reanalysis project. 1996.pdf. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 77(3) :437–472.
- Kersalé, M., Petrenko, A. A., Doglioli, A. M., Dekeyser, I., and Nencioli, F. (2013). Physical characteristics and dynamics of the coastal Latex09 eddy derived from in situ data and numerical modeling. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 118(1) :399–409.

- Kim, Y. H., Im, J., Ha, H. K., Choi, J. K., and Ha, S. (2014). Machine learning approaches to coastal water quality monitoring using GOCI satellite data. *GIScience and Remote Sensing*.
- Kleptsova, O., Pietrzak, J. D., and Stelling, G. S. (2009). On the accurate and stable reconstruction of tangential velocities in C-grid ocean models. *Ocean Modelling*, 28(1-3) :118–126.
- Koutsikopoulos, C. and Le Cann, B. (1996). Physical processes and hydrological structures related to the Bay of Biscay anchovy. *Scientia Marina*, 60(SUPPL. 2) :9–19.
- Krinitzkiy, M. A., Zyulyaeva, Y. A., and Gulev, S. K. (2019). Clustering of polar vortex states using convolutional autoencoders. *CEUR Workshop Proceedings*, 2426(September) :52–61.
- Larcombe, P. and Morrison-Saunders, A. (2017). Managing marine environments and decision-making requires better application of the physical sedimentary sciences. *Australasian Journal of Environmental Management*, 24(2) :200–221.
- Lazure, P. and Dumas, F. (2008). An external-internal mode coupling for a 3D hydrodynamical model for applications at regional scale (MARS). *Advances in Water Resources*, 31(2) :233–250.
- Lazure, P. and Jegou, A. M. (1998). 3D modelling of seasonal evolution of Loire and Gironde plumes on Biscay Bay continental shelf. *Oceanologica Acta*, 21(2) :165–177.
- Le Cann, B. (1990). Barotropic tidal dynamics of the Bay of Biscay shelf : observations, numerical modelling and physical interpretation. *Continental Shelf Research*, 10(8) :723–758.
- Le Hir, P. (2015). *Modélisation de la dynamique sédimentaire pour l’environnement côtier et estuarien, et stratégie de validation*, volume 1. : Université de Bretagne Occidentale, ubo edition.
- Le Hir, P., Monbet, Y., and Orvain, F. (2007). Sediment erodability in sediment transport modelling : Can we account for biota effects? *Continental Shelf Research*, 27(8) :1116–1142.
- Leathers, R. A., Roesler, C. S., and McCormick, N. J. (1999). Ocean inherent optical property determination from in-water light field measurements. Technical report.
- Leidner, S. M., Annane, B., McNoldy, B., Hoffman, R., and Atlas, R. (2018). Variational analysis of simulated ocean surface winds from the cyclone Global Navigation Satellite System (CYGNSS) and evaluation using a regional OSSE. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 35(8) :1571–1584.

- Lek, S., Delacoste, M., Baran, P., Dimopoulos, I., Lauga, J., and Aulagnier, S. (1996). Application of neural networks to modelling nonlinear relationships in ecology. *Ecological Modelling*, 90(1) :39–52.
- Lguensat, R., Tandeo, P., Ailliot, P., Pulido, M., and Fablet, R. (2017). The Analog Data Assimilation. *Monthly Weather Review*.
- Li, Y. and Allen-Zhu, Z. (2019). What can resnet learn efficiently, going beyond kernels? *arXiv*.
- Liu, X. and Wang, M. (2016). Analysis of ocean diurnal variations from the Korean Geostationary Ocean Color Imager measurements using the DINEOF method. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*.
- Liu, X. and Wang, M. (2021). Super-Resolution of VIIRS-Measured Ocean Color Products Using Deep Convolutional Neural Network. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 59(1) :114–127.
- Lorenzo, A. T., Morzfeld, M., Holmgren, W. F., and Cronin, A. D. (2017). Optimal interpolation of satellite and ground data for irradiance nowcasting at city scales. *Solar Energy*, 144 :466–474.
- Mengual, B. (2016). Spatio-temporal variability of sediment fluxes in the Bay of Biscay : relative contributions of climate forcings and trawling activities. Technical report.
- Mengual, B., Hir, P. L., Cayocca, F., and Garlan, T. (2017). Modelling fine sediment dynamics : Towards a common erosion law for fine sand, mud and mixtures. *Water (Switzerland)*, 9(8).
- Mengual, B., Le Hir, P., Cayocca, F., and Garlan, T. (2019). Bottom trawling contribution to the spatio-temporal variability of sediment fluxes on the continental shelf of the Bay of Biscay (France). *Marine Geology*, 414(July 2018) :77–91.
- Merten, G. H., Capel, P. D., and Minella, J. P. (2014). Effects of suspended sediment concentration and grain size on three optical turbidity sensors. *Journal of Soils and Sediments*, 14(7) :1235–1241.
- Milliman, J. D., Huang-ting, S., Zuo-sheng, Y., and H. Mead, R. (1985). Transport and deposition of river sediment in the Changjiang estuary and adjacent continental shelf. *Continental Shelf Research*.
- Mitchell, C. and Cunningham, A. (2015). Remote sensing of spatio-temporal relationships between the partitioned absorption coefficients of phytoplankton cells and mineral particles and euphotic zone depths in a partially mixed shelf sea. *Remote Sensing of Environment*, 160 :193–205.

- Mobley, C. D. (1994). *Light and water : radiative transfer in natural waters*. Academic press.
- Moore, A. M., Martin, M. J., Akella, S., Arango, H. G., Balmaseda, M., Bertino, L., Ciavatta, S., Cornuelle, B., Cummings, J., Frolov, S., Lermusiaux, P., Oddo, P., Oke, P. R., Storto, A., Teruzzi, A., Vidard, A., and Weaver, A. T. (2019). Synthesis of ocean observations using data assimilation for operational, real-time and reanalysis systems : A more complete picture of the state of the ocean. *Frontiers in Marine Science*, 6(MAR) :1–6.
- Morel, A. and Bélanger, S. (2006). Improved detection of turbid waters from ocean color sensors information. *Remote Sensing of Environment*, 102(3-4) :237–249.
- Morel, A. and Prieur, L. (1977). Analysis of variations in ocean color1. *Limnology and Oceanography*, 22(4) :709–722.
- Nazeer, M., Bilal, M., Alsahli, M., Shahzad, M., and Waqas, A. (2017). Evaluation of Empirical and Machine Learning Algorithms for Estimation of Coastal Water Quality Parameters. *ISPRS International Journal of Geo-Information*.
- Nechad, B., Ruddick, K. G., and Park, Y. (2010). Calibration and validation of a generic multisensor algorithm for mapping of total suspended matter in turbid waters. *Remote Sensing of Environment*, 114(4) :854–866.
- O’Donncha, F., Hu, Y., Palmes, P., Burke, M., Filgueira, R., and Grant, J. (2022). A spatio-temporal LSTM model to forecast across multiple temporal and spatial scales. *Ecological Informatics*, 69(September 2021) :101687.
- O’Donncha, F., Zhang, Y., Chen, B., and James, S. C. (2019). Ensemble model aggregation using a computationally lightweight machine-learning model to forecast ocean waves. *Journal of Marine Systems*, 199(February) :103206.
- Oliver, M. A. and Webster, R. (2007). Kriging : a method of interpolation for geographical information systems. <https://doi.org/10.1080/02693799008941549>, 4(3) :313–332.
- Oms, P.-e. (2019). *Transferts multi-échelles des apports continentaux dans le golfe de Gascogne* To cite this version : HAL Id : tel-02354264 Pierre-Emmanuel OMS *Transferts multi-échelles des apports continentaux dans le golfe de*. Nnt : 2019bres0038 . tel-02354264, Université de Bretagne occidentale - Brest.
- O’Reilly, J. and Maritorena, S. (2000). Ocean color chlorophyll a algorithms for SeaWiFS, OC2, and OC4 : Version 4. *SeaWiFS postlaunch . . .*, pages 8–22.

- Orenstein, E. C. and Beijbom, O. (2017). Transfer learning and deep feature extraction for planktonic image data sets. *Proceedings - 2017 IEEE Winter Conference on Applications of Computer Vision, WACV 2017*, pages 1082–1088.
- Ouala, S., Herzet, C., and Fablet, R. (2018). Sea surface temperature prediction and reconstruction using patch-level neural network representations.
- Owens, P. N. (2020). Soil erosion and sediment dynamics in the Anthropocene : a review of human impacts during a period of rapid global environmental change. *Journal of Soils and Sediments*, 20(12) :4115–4143.
- Pairaud, I. (2005). Modélisation et analyse de la marée interne dans le golfe de Gascogne. page 356.
- Paradis, S., Goñi, M., Masqué, P., Durán, R., Arjona-Camas, M., Palanques, A., and Puig, P. (2021). Persistence of Biogeochemical Alterations of Deep-Sea Sediments by Bottom Trawling. *Geophysical Research Letters*, 48(2) :1–12.
- Peine, F., Turnewitsch, R., Mohn, C., Reichelt, T., Springer, B., and Kaufmann, M. (2009). The importance of tides for sediment dynamics in the deep sea-Evidence from the particulate-matter tracer ^{234}Th in deep-sea environments with different tidal forcing. *Deep-Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 56(7) :1182–1202.
- Pennucci, G., Grasso, R., and Zanasca, P. (2003). Optical properties and water clarity, a comparison between in situ measurements and satellite derived products in the Adriatic sea. Technical report, NURC-NATO Undersea Research Center, La Spezia.
- Perrot, L., Gohin, F., Ruiz-Pino, D., Lampert, L., Huret, M., Dessier, A., Malestroit, P., Dupuy, C., and Bourriau, P. (2018). Coccolith-derived turbidity and hydrological conditions in May in the Bay of Biscay. *Progress in Oceanography*, 166(December 2017) :41–53.
- Petus, C., Chust, G., Gohin, F., Doxaran, D., Froidefond, J. M., and Sagarminaga, Y. (2010). Estimating turbidity and total suspended matter in the Adour River plume (South Bay of Biscay) using MODIS 250-m imagery. *Continental Shelf Research*, 30(5) :379–392.
- Petus, C., Marieu, V., Novoa, S., Chust, G., Bruneau, N., and Froidefond, J. M. (2014). Monitoring spatio-temporal variability of the Adour River turbid plume (Bay of Biscay, France) with MODIS 250-m imagery. *Continental Shelf Research*, 74 :35–49.
- Ping, B., Su, F., and Meng, Y. (2016). An improved DINEOF algorithm for filling missing values in spatio-temporal sea surface temperature data. *PLoS ONE*, 11(5) :1–12.

- ping Chen, Y., jie Fu, B., Zhao, Y., bo Wang, K., Zhao, M. M., fu Ma, J., Wu, J. H., Xu, C., gang Liu, W., and Wang, H. (2020). Sustainable development in the Yellow River Basin : Issues and strategies. *Journal of Cleaner Production*, 263.
- Pingree, R. D. and New, A. L. (1995). Structure, seasonal development and sunglint spatial coherence of the internal tide on the Celtic and Armorican shelves and in the Bay of Biscay. *Deep-Sea Research Part I*, 42(2) :245–284.
- Pondaven, P. (2004). *Biogéochimie du fer le long de la marge continentale du Golfe de Gascogne : Distributions, sources et transport*. PhD thesis, Institut Universitaire Européen de la Mer.
- Prego, R., Boi, P., and Cobelo-García, A. (2008). The contribution of total suspended solids to the Bay of Biscay by Cantabrian Rivers (northern coast of the Iberian Peninsula). *Journal of Marine Systems*, 72(1-4) :342–349.
- Puillat, I., Lazure, P., Jégou, A. M., Lampert, L., and Miller, P. I. (2004). Hydrographical variability on the French continental shelf in the Bay of Biscay, during the 1990s. *Continental Shelf Research*, 24(10) :1143–1163.
- Renosh, P. R., Jourdin, F., Charantonis, A. A., Yala, K., Rivier, A., Badran, F., Thiria, S., Guillou, N., Leckler, F., Gohin, F., and Garlan, T. (2017). Construction of multi-year time-series profiles of suspended particulate inorganic matter concentrations using machine learning approach. *Remote Sensing*, 9(12).
- Ribbe, J. and Holloway, P. E. (2001). A model of suspended sediment transport by internal tides. *Continental Shelf Research*, 21(4) :395–422.
- Rivier, A. (2013). *Dynamique des matières en suspension minérales des eaux de surface de la Manche observée par satellite et modélisée numériquement* Thèse soutenue le 4 juillet 2013 devant le jury composé de : Christel PINAZO Aurélie Rivier Préparée au sein du laboratoire D. PhD thesis, UBO.
- Rodi, W. and Mansour, N. (1990). One-equation near-wall turbulence modeling with the aid of direct simulation data. *Center for Turbulence Research*, Summer pro(1) :107–124.
- Rosenblatt, F. (1957). The Perceptron - A Perceiving and Recognizing Automaton.
- Rymszewicz, A., O’Sullivan, J. J., Bruen, M., Turner, J. N., Lawler, D. M., Conroy, E., and Kelly-Quinn, M. (2017). Measurement differences between turbidity instruments, and their implications for suspended sediment concentration and load calculations : A sensor inter-comparison study. *Journal of Environmental Management*, 199 :99–108.

- Sanchez-Arcilla, A., Staneva, J., Cavaleri, L., Badger, M., Bidlot, J., Sorensen, J. T., Hansen, L. B., Martin, A., Saulter, A., Espino, M., Miglietta, M. M., Mestres, M., Bonaldo, D., Pezzutto, P., Schulz-Stellenfleth, J., Wiese, A., Larsen, X., Carniel, S., Bolaños, R., Abdalla, S., and Tiesi, A. (2021). CMEMS-Based Coastal Analyses : Conditioning, Coupling and Limits for Applications. *Frontiers in Marine Science*, 8(March).
- Sasaki, Y. (1955). A Fundamental Study of the Numerical Prediction Based on the Variational Principle. *Geophysical Insitute, Tokyo University*.
- Saulnier, J.-B., Escobar-Valencia, G., Grognet, E., and Waeles, M. (2021). 3D Modeling for the Dispersion of Sediments Dredged in the Port of La Rochelle with Open TELEMAC-MASCARET. *Proceedings of the papers submitted to the 2020 TELEMAC-MASCARET User Conference October 2021*, pages 129–137.
- Saulquin, B., Gohin, F., and Fanton d’Andon, O. (2019). Interpolated fields of satellite-derived multi-algorithm chlorophyll-a estimates at global and European scales in the frame of the European Copernicus-Marine Environment Monitoring Service. *Journal of Operational Oceanography*, 12(1) :47–57.
- Sidén, P. and Lindsten, F. (2020). Deep Gaussian markov random fields. *37th International Conference on Machine Learning, ICML 2020, PartF16814* :8875–8885.
- Simon, E. (2007). *Assimilation variationnelle de données pour des modèles emboîtés*. PhD thesis, UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER -.
- Syvitski, J. P., Vörösmarty, C. J., Kettner, A. J., and Green, P. (2005). Impact of humans on the flux of terrestrial sediment to the global coastal ocean. *Science*, 308(5720) :376–380.
- Tandeo, P., Ailliot, P., Ruiz, J., Hannart, A., Chapron, B., Cuzol, A., Monbet, V., Easton, R., and Fablet, R. (2015). Combining Analog Method and Ensemble Data Assimilation : Application to the Lorenz-63 Chaotic System. *Machine Learning and Data Mining Approaches to Climate Science*, pages 3–12.
- Tecchiato, S., Collins, L., Parnum, I., and Stevens, A. (2015). The influence of geomorphology and sedimentary processes on benthic habitat distribution and littoral sediment dynamics : Geraldton, Western Australia. *Marine Geology*, 359 :148–162.
- Tew-Kai, E., Quilfen, V., Cachera, M., and Boutet, M. (2020). Dynamic coastal-shelf seascapes to support marine policies using operational coastal oceanography : The french example. *Journal of Marine Science and Engineering*, 8(8).
- Tolman, H. L. (2009). User manual and system documentation of WAVEWATCH-III version 3.14. *Technical note*, (3.14) :220.

- Tomas-Burguera, M., Beguería, S., Vicente-Serrano, S., and Maneta, M. (2018). Optimal Interpolation scheme to generate reference crop evapotranspiration. *Journal of Hydrology*, 560 :202–219.
- Tyrrell, T. and Taylor, A. H. (1996). A modelling study of *Emiliana huxleyi* in the NE Atlantic. *Journal of Marine Systems*.
- Vance, T. C., Merati, N., Yang, C., and Yuan, M. (2016). Cloud computing for ocean and atmospheric science. In *OCEANS 2016 MTS/IEEE Monterey*, pages 1–4.
- Velliangiri, S., Alagumuthukrishnan, S., and Thankumar Joseph, S. I. (2019). A Review of Dimensionality Reduction Techniques for Efficient Computation. *Procedia Computer Science*, 165 :104–111.
- Vercruyssen, K., Grabowski, R. C., and Rickson, R. J. (2017). Suspended sediment transport dynamics in rivers : Multi-scale drivers of temporal variation. *Earth-Science Reviews*, 166 :38–52.
- Verney, R., Brun-Cottan, J. C., Lafite, R., Deloffre, J., and Taylor, J. A. (2006). Tidally-induced shear stress variability above intertidal mudflats in the macrotidal seine estuary. *Estuaries and Coasts*, 29(4) :653–664.
- Verney, R., Lafite, R., Brun-cottan, J. C., Hir, P. L., Dyneco, L., Cnrs, F. U. M. R., Saint, M., Cedex, A., and Cnrs, U. M. R. (2011). Archimer. *Continental Shelf Research*, 31(10).
- Vient, J.-M., Fablet, R., Jourdin, F., and Delacourt, C. (2022). End-to-End Neural Interpolation of Satellite-Derived Sea Surface Suspended Sediment Concentrations. *Remote Sensing*, 14(16) :4024.
- Vient, J. M., Jourdin, F., Fablet, R., Mengual, B., Lafosse, L., and Delacourt, C. (2021). Data-driven interpolation of sea surface suspended concentrations derived from ocean colour remote sensing data. *Remote Sensing*, 13(17).
- Vrel, A., Boust, D., Lesueur, P., Deloffre, J., Dubrulle-Brunaud, C., Solier, L., Rozet, M., Thouroude, C., Cossonnet, C., and Thomas, S. (2013). Dating of sediment record at two contrasting sites of the Seine River using radioactivity data and hydrological time series. *Journal of Environmental Radioactivity*, 126 :20–31.
- Wang, Y. P., Voulgaris, G., Li, Y., Yang, Y., Gao, J., Chen, J., and Gao, S. (2013). Sediment resuspension, flocculation, and settling in a macrotidal estuary. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 118(10) :5591–5608.
- Weiss, K., Khoshgoftaar, T. M., and Wang, D. D. (2016). *A survey of transfer learning*, volume 3. Springer International Publishing.

- Winterwerp, J. C. (2002). On the flocculation and settling velocity of estuarine mud. *Continental Shelf Research*, 22(9) :1339–1360.
- Zeytounian, R. K. (2003). Joseph Boussinesq and his approximation : A contemporary view. *Comptes Rendus - Mecanique*, 331(8) :575–586.
- Zhang, L., Zhang, L., and Du, B. (2016). Deep learning for remote sensing data : A technical tutorial on the state of the art. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine*, 4(2) :22–40.
- Zhen, Y., Tandeo, P., Leroux, S., Metref, S., Penduff, T., and Le Sommer, J. (2020). An adaptive optimal interpolation based on analog forecasting : Application to ssh in the gulf of Mexico. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 37(9) :1697–1711.

Titre : Assimilation des dynamiques spatio-temporelles de la turbidité par synergie entre mesures satellitaires de la couleur de l'eau et simulations hydrodynamiques

Mot clés : Turbidité, Réseaux de neurones, Assimilation de données, Forçages océaniques

Résumé : La caractérisation de la dynamique des sédiments en suspension dans l'océan fournit des informations essentielles pour les études scientifiques et les besoins opérationnels. En raison de l'interaction complexe entre les forçages naturels et anthropiques, la compréhension et la surveillance de la dynamique des sédiments en suspension restent très difficiles. Les schémas classiques d'analyse de données qu'ils soient in-situ, observés par satellites ou modélisés doivent jongler avec de nombreuses incertitudes et approximations. Cette thèse explore les capacités des méthodes de réseaux de neurones à combiner les approches et les types de don-

nées pour aboutir à de meilleures reconstructions. Dans cette thèse est mise en oeuvre la méthode 4DVarNet, basée sur une formulation d'assimilation de données, mais dans une architecture de réseaux de neurones. Cette méthode est comparée et évaluée dans plusieurs cas de figures (interpolation et prévision) qui montrent des résultats très encourageants concernant sa capacité à produire des reconstructions pertinentes et de qualité supérieure aux méthodes classiques. Ces résultats permettent de discuter de l'importance des forçages océaniques et des mesures pour pouvoir améliorer la caractérisation des dynamiques de l'océan.

Title: Assimilation of spatio-temporal dynamics of turbidity by combining satellite measurements of ocean color and hydrodynamic simulations

Keywords: Turbidity, Neural networks, Data assimilation, Oceanic forcing

Abstract: Characterization of suspended sediment dynamics in the ocean provides essential information for scientific studies and operational challenges. Due to the complex interaction between natural and anthropogenic forcings, understanding and monitoring suspended sediment dynamics remains very challenging. Conventional data analysis schemes whether in-situ, satellite observed or modeled must juggle with many uncertainties and approximations. This thesis explores the capabilities of neural network methods to combine

approaches and data types to achieve better reconstructions. In this thesis the 4DVarNet method is implemented, based on a data assimilation formulation but in a neural network architecture. This method is compared and evaluated in several cases (interpolation and forecasting) which show very encouraging results regarding its ability to produce relevant reconstructions of higher quality than classical methods. These results allow us to discuss the importance of oceanic forcing and measurements to better characterize ocean dynamics.