HAL open science

Variabilité de la salinité satellitaire et décharges de fleuves

Clovis Thouvenin-Masson

To cite this version:

Clovis Thouvenin-Masson. Variabilité de la salinité satellitaire et décharges de fleuves. Météorologie. Sorbonne Université, 2023. Français. NNT : 2023SORUS669 . tel-04546222

HAL Id: tel-04546222

https://theses.hal.science/tel-04546222

Submitted on 15 Apr 2024

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.

THESE DE DOCTORAT DE SORBONNE UNIVERSITE

École doctorale : 129 - Sciences de l'Environnement d'Île-de-France

Spécialité : Océanographie physique

Réalisée au

Laboratoire d'Océanographie et du Climat : Expérimentations et Approches Numériques

Présentée par

Clovis THOUVENIN-MASSON

Pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE SORBONNE UNIVERSITE

Variabilité de la salinité et décharges de fleuves

Soutenue le 22 décembre 2023

Devant un jury composé de :

Présidente :	Hélène CHEPFER	LMD, Paris
Directrice de thèse :	Jacqueline BOUTIN	LOCEAN, Paris
Rapporteur :	Fabien DURAND	LEGOS, Toulouse
Rapporteur :	Aida ALVERA AZCARATE	Université de Liège
Examinateur :	Nicolas KOLODZIEJCZYK	LOPS, Brest
Examinateur :	Pierre-Yves LE TRAON	Mercator-Ocean, Toulouse
Invité :	Vincent ECHEVIN	LOCEAN, Paris
Invité :	Antoine MANGIN	ACRI-st, Sophia-Antipolis

Résumé :

La salinité est une variable clé pour l'étude des océans et du climat. Par son effet sur la densité, elle est l'un des moteurs de la circulation thermohaline. De plus, sa propriété conservatrice en fait un traceur idéal des masses d'eau ; en surface, elle dépend fortement des apports d'eau douce entrant et sortant de l'océan. Aussi, la salinité de surface (SSS), mesurée par satellite depuis 2010, et la modélisation de la circulation océanique permettent de mieux comprendre et contraindre les processus en jeu dans les échanges entre l'océan et les autres réservoirs du cycle de l'eau.

Durant ma thèse, je me suis plus particulièrement intéressé à l'étude de régions tropicales, sous l'influence d'apports d'eau douce par les rivières ou par les précipitations, en particulier la région de l'upwelling du Sénégal-Mauritanie.

Un préalable a été d'établir l'incertitude sur les champs déduits des SSS satellitaires en prenant en compte la variabilité de la SSS et les effets de sous-échantillonnages à différentes échelles spatio-temporelles. Les champs de SSS CCI (Climate Change Initiative) générés à partir des mesures satellitaires SMOS (2010-), Aquarius (2015-2021) et SMAP (2015-) sont intégrés sur des échelles de 50 km et une semaine ou un mois. Leur validation se base sur des comparaisons à des SSS *in situ*, mais une part des différences provient de la différence de résolution spatio-temporelle des données comparées. A partir des réanalyses GLORYS, j'ai estimé les erreurs de représentativité correspondantes, et montré qu'elles permettent de réconcilier en grande partie les incertitudes estimées lors de la génération des champs SSS CCI (en grande partie liées au bruit intrinsèque des mesures satellitaires) et les incertitudes obtenues par comparaison à des mesures *in situ*. A l'échelle globale, les erreurs de représentativité expliquent 33 % (15 %) de l'écart (std différence) entre les SSS satellitaires mensuelles (hebdomadaires) et les SSS ponctuelles Argo. Une fois cet effet pris en compte, l'incertitude sur les SSS CCI satellitaire est estimée à 0.10 pour les champs mensuels, 0.14 pour les champs hebdomadaires.

J'ai également caractérisé la variabilité de la SSS, à l'aide d'une méthode d'analyse spectrale en trois dimensions (latitude, longitude et temps) que j'ai développée, et de simulations océaniques à haute résolution. Les champs satellitaires actuels permettent d'échantillonner la majeure partie de la variabilité de la SSS dans les zones tropicales, mais manquent une grande partie de la variabilité à plus haute latitude, qu'une mission

satellitaire à 10km de résolution, telle que la mission SMOS-HR étudiée au CNES ou la mission FRESCH récemment soumise à l'ESA, pourrait résoudre.

Dans la seconde partie de ma thèse, j'ai analysé la variabilité de la SSS dans la région de l'upwelling Sénégal-Mauritanie caractérisée par un important apport d'eau fluviale et traversée saisonnièrement par l'ITCZ. Sur la zone d'étude, les comparaisons aux mesures *in situ* montrent un très bon accord pour les SSS CCI (r^2=0.94), légèrement moindre pour les analyses GLORYS et les simulations CROCO. Néanmoins, à moins de 50km de la cote, les SSS satellitaires comparées aux SSS du mouillage Melax sont moins précises que les réanalyses GLORYS mettant à nouveau en exergue le besoin de mesures satellitaires à plus haute résolution spatiale qui permettraient de s'approcher jusqu'à 10 km de la côte. Les modèles océaniques actuels, dont la réanalyse GLORYS, utilisent très souvent des forçages de débits de fleuves climatologiques. Afin de mettre en évidence l'impact de la variation interannuelle des débits de fleuves et des précipitations sur la SSS, j'ai mis en place différentes configurations de forçage qui ont été utilisées dans des simulations CROCO menées au LOCEAN. J'ai montré que les variabilités interannuelles des débits de fleuve ont un effet sensible sur la SSS, plus ou moins marqué en fonction de la propagation des panaches qui dépendent des conditions de vent et de la circulation océanique.

Abstract:

Salinity is a key variable to study oceans and climate. Through its effect on density, it is one of the driving forces behind thermohaline circulation. Moreover, its conservative property makes it an ideal tracer of water masses; at the surface, it is highly dependent on freshwater inflows and outflows from the ocean. As a result, sea surface salinity (SSS), measured by satellite since 2010, and ocean circulation modelling are helping to better understand and constrain the processes involved in exchanges between the ocean and the other reservoirs in the water cycle.

During my PhD thesis, I was particularly interested in studying tropical regions under the influence of freshwater inputs from rivers or rainfall, in particular the Senegal-Mauritania upwelling region.

A prerequisite was to establish the uncertainty on the fields deduced from satellite SSS, taking into account SSS variability and the effects of sub-sampling at different spatio-temporal scales. CCI (Climate Change Initiative) SSS fields generated from SMOS (2010-), Aquarius (2015-2021) and SMAP (2015-) satellite measurements are integrated on scales of 50 km and one week or one month. Their validation is based on comparisons with *in situ* SSS, but part of the differences stem from the difference in spatio-temporal resolution of the data compared. Using GLORYS reanalyses, I have estimated the corresponding representativeness errors, and I have shown that they allow to reconcile, to a large extent, the uncertainties estimated during the generation of CCI SSS fields (largely linked to the intrinsic noise of satellite measurements) and the uncertainties obtained by comparison with *in situ* measurements. On a global scale, representativeness errors account for 33 % (15 %) of the difference (std difference) between monthly (weekly) satellite SSS and Argo pointwise SSS. Once this effect has been taken into account, the uncertainty in satellite CCI SSS is estimated at 0.10 for monthly fields, 0.14 for weekly fields.

I have also characterized SSS variability, using a three-dimensional (latitude, longitude and time) spectral analysis method I developed, and high-resolution ocean simulations. Current satellite fields are able to sample most of the SSS variability in tropical areas, but miss much of the variability at higher latitudes, which a 10km resolution satellite mission, such as the SMOS-HR mission being studied at CNES or the FRESCH mission recently submitted to ESA, could resolve.

In the second part of my PhD thesis, I analyzed the variability of the SSS in the Senegal-Mauritania upwelling region, characterized by a large inflow of river water and crossed seasonally by the ITCZ. Over the study area, comparisons with *in situ* measurements show very good agreement for CCI SSS (r2=0.94), slightly less so for GLORYS analyses and CROCO simulations. Nevertheless, at less than 50km from the coast, satellite SSSs compared with SSSs from the Melax mooring are less accurate than GLORYS reanalyses, once again highlighting the need for satellite measurements with higher spatial resolution, which would enable us to get as close as 10km from the coast. Current ocean models, including the GLORYS reanalysis, very often use climatological river flow forcings. In order to highlight the impact of interannual variation in river discharge and precipitation on SSS, I set up different forcing configurations that were used in CROCO simulations conducted at LOCEAN. I have shown that the interannual variability of river flows has a significant effect on SSS, to a greater or lesser extent depending on the propagation of plumes, which depend on wind conditions and ocean circulation.

Remerciements

Je souhaite avant toute chose remercier ma directrice de thèse Jacqueline Boutin, pour m'avoir fait confiance et m'avoir permis de travailler avec toi ces 5 dernières années, d'abord en tant qu'ingénieur de recherche, puis d'avoir renouvelé ta confiance en me permettant de poursuivre en thèse, de m'avoir suivi de près tout en me laissant une liberté dans mes axes de recherche. Travailler avec toi a été un réel plaisir.

Merci également aux membres du jury, pour avoir relu, commenté et corrigé de manière très pertinente ce manuscrit de thèse. Merci pour les discussions scientifiques très enrichissantes qui ont suivi l'exposé.

Je remercie particulièrement Vincent Échevin et Jean-Luc Vergely, avec qui j'ai travaillé en étroite collaboration, et qui m'ont apporté leur expertise avec toujours beaucoup de bienveillance. Merci aux membres de mon comité de suivi de thèse, Elisabeth Remy et William Llovel, pour leurs conseils et orientations pendant les réunions qui ont jalonné cette thèse.

Merci à toute l'équipe SMOS du LOCEAN, constituée de Jacqueline Boutin, Gilles Reverdin, Kirtana Naeck, Ana Parracho, Léa Olivier, Alexandre Supply, Audrey Hasson, Xavier Perrot, Dimitry Khvorostyanov et Fabrice Bonjean pour les réunions hebdomadaires toujours sources de nouvelles idées.

Je souhaite remercier les doctorants ou anciens doctorants que j'ai côtoyés pendant mon séjour au LOCEAN, et qui l'ont rendu si agréable. Ceux avec qui j'ai partagé mon bureau, en particulier Léa Olivier qui m'a donné le goût des cartes et des plantes, et Cosme Mosneron-Dupin qui l'a dignement remplacée sur la fin. Je remercie Léonard Barthélémy et Lea Raillard pour les excursions d'alpinisme et d'escalade en grande voies, ainsi que les nombreux doctorants grimpeurs du labo pour les multiples sorties : Robin Rolland, Kenza Himmich, Luther Ollier, Margaux Perhirin, Matthias Noël, Alessandra Stoppelli, Gaston Irrmann, François Challet, Marcellin Guilbert. Merci également à ceux qui ne grimpent pas, mais qui restent pour autant très sympathiques, en particulier Coraline Leseurre, Georges et Gina Baaklini, Pierre Chabert, Linus Vogt, Constantin Bône, Christophe Noisel, Clémentine Ricard, Léa Poli, Matthis Auger, Clément Haëck, Antoine Nasser, Yang Feng, et tous les autres.

Je remercie enfin ma famille proche, qui m'a beaucoup soutenu pendant ces trois ans, surtout d'un point de vue nutritionnel, et Marine pour m'avoir fourni le bureau en bord de mer dans lequel j'ai pu écrire ce manuscrit sereinement.

Activités scientifiques pendant la thèse

Publications

Comme premier auteur

Thouvenin-Masson, C., J. Boutin, V. Echevin, A. Lazar, J.-L. Vergely. " Interannual variability of Sea Surface Salinity in North-Eastern tropical Atlantic: influence of freshwater fluxes.", to be submitted in Remote Sensing of Environment.

Thouvenin-Masson, C., J. Boutin, J.-L. Vergely, G. Reverdin, A. C. Martin, S. Guimbard, N. Reul, R. Sabia, R. Catany and O. Hembise Fanton-d'Andon (2022). "Satellite and *in situ* sampling mismatches: Consequences for the estimation of satellite sea surface salinity uncertainties." Remote Sensing **14**(8): 1878.

Comme co-auteur

Boutin, J., N. Reul, J. Koehler, A. Martin, R. Catany, S. Guimbard, F. Rouffi, J. L. Vergely, M. Arias, M. Chakroun, G. Corato, V. Estella-Perez, A. Hasson, S. Josey, D. Khvorostyanov, N. Kolodziejczyk, J. Mignot, L. Olivier, G. Reverdin, D. Stammer, A. Supply, **C. Thouvenin-Masson**, A. Turiel, J. Vialard, P. Cipollini, C. Donlon, R. Sabia and S. Mecklenburg (2021). "Satellite-Based Sea Surface Salinity Designed for Ocean and Climate Studies." Journal of Geophysical Research: Oceans 126(11): e2021JC017676.

Boutin, J., J.-L. Vergely, E. P. Dinnat, P. Waldteufel, F. D'Amico, N. Reul, A. Supply and **C. Thouvenin-Masson** (2021). "Correcting Sea Surface Temperature Spurious Effects in Salinity Retrieved from Spaceborne L-Band Radiometer Measurements." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 59(9): 7256-7269.

Reul, N., S. A. Grodsky, M. Arias, J. Boutin, R. Catany, B. Chapron, F. D'Amico, E. Dinnat, C. Donlon, A. Fore, S. Fournier, S. Guimbard, A. Hasson, N. Kolodziejczyk, G. Lagerloef, T. Lee, D. M. Le Vine, E. Lindstrom, C. Maes, S. Mecklenburg, T. Meissner, E. Olmedo, R. Sabia, J. Tenerelli, **C. Thouvenin-Masson**, A. Turiel, J. L. Vergely, N. Vinogradova, F. Wentz and S. Yueh (2020). "Sea surface salinity estimates from spaceborne L-band radiometers: An overview of the first decade of observation (2010–2019)." Remote Sensing of Environment 242: 111769.

Reverdin, G., Olivier, L., Cabanes, C., Boutin, J., **Thouvenin-Masson, C.**, Vergely J.-L., Kolodziejczyk, N., Thierry V., Khvorostyanov, D., and Jouanno, J. "Missing Argo float profiles in highly stratified waters of the Amazon River plume", submitted to J. Atmos. Oceanic Technol.

Communications scientifiques

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Vergely, J. L., Khvorostyanov, D., & Tarot, S. (2020, May). CATDS CEC-LOCEAN debiased version 4 Sea Surface Salinity. EGU General Assembly 2020 (pp. 4-8).

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Vergely, J. L., Khvorostyanov, D., Perrot, X., & Reverdin, G. (2021, April). Salinity variability in satellite subpixels: impact on satellite *in situ* comparisons. EGU General Assembly Conference Abstracts (pp. EGU21-1205).

Boutin, J., Martin, A., **Thouvenin-Masson, C.**, Reul, N., & Catany, R. (2022, March). Sea Surface Salinity and its uncertainty in 2010-2020 CCI version 3 fields. EGU General Assembly Conference Abstracts (pp. EGU22-3071).

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Vergely, J.-L., Reverdin, G., Martin, A., Guimbard, S. (2022, January). Influence of sampling mismatch uncertainties on the validation of satellite CCI sea surface salinity and associated uncertainties. Ocean Sciences meeting.

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Vergely, J.-L., Reverdin, G., Martin, A., Guimbard, S. (2022, June). Salinity variability in satellite subpixels: toward an interpretation of SMOS – Argo residuals. Salinity Conference, New-York, USA.

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Vergely, J.-L., Reverdin, G., Echevin V. (2022, December). Sea Surface Salinity spatial variability: what is detected and what is missed with current satellite generation? OHIS meeting, Chizé, France

Thouvenin-Masson, C., J. Boutin, V. Echevin, A. Lazar, J.-L. Vergely. (2023, April). Étude de processus en Afrique de l'ouest. Annual workshop SMOS-Ocean TOSCA, Paris, France.

Thouvenin-Masson, C., Boutin, J., Perrot, X., Vergely, J.-L., Reverdin, G. (2021, March). Variabilité de la SSS simulée par Mercator aux échelles sous-maille à SMOS : vers une explication des résidus SMOS - Argo SSS? Annual workshop SMOS-Ocean TOSCA, online.

Publications de données

Boutin J., Vergely J.L, Olivier L., Reverdin G., Perrot X., **Thouvenin-Masson C.** (2022). SMOS SMAP High Resolution SSS maps in regions of high variability, generated by CATDS CEC. SEANOE. https://doi.org/10.17882/90082

Boutin, J.; Vergely, J.-L.; Reul, N.; Catany, R.; Koehler, J.; Martin, A.; Rouffi, F.; Arias, M.; Chakroun, M.; Corato, G.; Estella-Perez, V.; Guimbard, S.; Hasson, A.; Josey, S.; Khvorostyanov, D.; Kolodziejczyk, N.; Mignot, J.; Olivier, L.; Reverdin, G.; Stammer, D.; Supply, A.; **Thouvenin-Masson, C.**; Turiel, A.; Vialard, J.; Cipollini, P.; Donlon, C. (2021): ESA Sea Surface Salinity Climate Change Initiative (Sea_Surface_Salinity_cci): weekly and monthly sea surface salinity products, v03.21, for 2010 to 2020. NERC EDS Centre for Environmental Data Analysis, 08 October 2021.
doi: https://dx.doi.org/10.5285/5920a2c77e3c45339477acd31ce62c3c

Campagne en mer

Campagne PIRATA-FR32 du 14 février au 12 avril 2021 ; 40 jours à bord du Thalassa dans l'Atlantique tropical. Renouvellement de mouillages de réseau PIRATA, CTD, déploiement de capteurs.

Formations et cours de l'école doctorale

Statistique et introduction au machine learning, 2023 (12h)
FOET - Observation et Experimentation, 2023 (28h)
Télédétection spatiale de la biomasse phytoplanctonique et des rejets fluviaux dans les océans: principe, méthodes et applications, 2023 (18h)
JDD : Journées des doctorants 2023 ED 129, 2023 (15h)
Environnement arctique, 2021 (20h)
Changement climatique : sciences, sociétés, politique, 2021 (18h)

Activités au laboratoire

Participation à l'organisation et à l'animation de trois "Mois thématiques" (club de lecture, séminaires et "goûter-débat") du laboratoire.

Sommaire

I. Introduction 13

1) Définition de la salinité 13

a. Pourquoi l'océan est-il salé ? 13
b. Composition et définitions 14

2) Importance de la salinité dans le système océanique 17

a. Stratification (interactions air-mer et océan de subsurface) 17
b. Le rôle de la salinité dans l'évolution des masses d'eau 18
c. Traceur des masses d'eau 20

3) Importance de la salinité dans le cycle de l'eau 21

a. ITCZ et gyres subtropicales 23
b. Fleuves 24

4) La mesure de la salinité 26

a. Mesure *in situ* 26
b. Mesure satellitaire 29

5) Que sait-on de la variabilité de la salinité ? 32

6) But de la thèse et plan 34

II. Données et méthodes 37

1) La mesure satellitaire de la SSS par radiométrie en bande L 37

a. Principe de la mesure 37
b. Missions satellitaires pour la mesure de la SSS 43
c. Champs de SSS dérivés au CATDS 46
d. Champs de SSS dérivés par le projet CCI 47

2) La mesure de la salinité *in situ* 51

a. Argo 51
b. ThermoSalinoGraphes 53
c. Mouillages 54
d. La campagne PIRATA-FR32 57

3) Les modèles océaniques 63

a. Réanalyse GLORYS 63
b. CROCO 64
c. APLUME36 67
d. GIGATL 68

4) Décharges de fleuves 69

a. GloFAS 70
b. ISBA 72
c. Comparaison des deux jeux de données 73

5) Champs de précipitation 75

a. ERA5 75

b. IMERG 76
c. Comparaison des deux jeux de données 77
6) Définition du vocabulaire relié aux incertitudes 79
7) Méthodes de colocalisations 81
8) Méthode de calcul de la variabilité GLORYS 84
a. Calcul de la variabilité de la SSS sous la résolution des champs satellitaires à partir d'un modèle 84
b. Extrapolation de la variabilité vers les échelles inférieures 86
c. Méthode de validation des incertitudes 90
9) Analyse spectrale de la SSS 92
10) Traitement des salinités issues du modèle CROCO dans la région de l'Afrique de l'Ouest94
a. Équation bilan de la salinité 94
b. Décomposition en climatologies et anomalies interannuelles 95
c. Estimation de l'effet d'un biais en SST sur l'évaporation : formules de bulk 96
d. Calcul de la stabilité de la masse d'eau 98
III. Prise en compte de la variabilité de la SSS pour l'interprétation des mesures satellitaires actuelles 99
1) Introduction 99
2) Caractérisation de la variabilité de la SSS à différentes échelles spatio-temporelles 100
a. Analyse des écart types 100
b. Analyse des distributions 103
3) Publication : le rôle de l'incertitude liée à l'erreur d'échantillonnage pour les validations des données satellitaires à partir de comparaisons à des données *in situ* 105
4) Validation des résultats avec d'autres modèles 127
5) Prolongation de l'étude sur la période CCI complète 128
6) Conclusion 133
IV. Intérêt d'une mission satellitaire haute résolution de type SMOS-HR/FRESCH pour l'échantillonnage de la variabilité de la SSS 135
1) Introduction 135
2) Études spectrales de la SSS issue de la simulation APLUME36 138
3) Études spectrales de la SSS issue de la simulation GIGATL 140
4) Conclusions 144
V. Variabilité de la salinité dans la région Sénégal-Mauritanie : liens avec la variabilité des forçages de flux d'eau douce 145
1) Introduction 145

2) Études préliminaires 146
3) Publication: Interannual variability of Sea Surface Salinity in North-Eastern Tropical Atlantic: influence of freshwater fluxes 150
4) Compléments à la publication : profils verticaux et stratification 191
a. Analyse de la stratification 191
b. Analyse d'autres régions couvertes par les simulations CROCO 195
5) Problématique de la simulation avec précipitations climatologiques 199
6) Conclusion 200
VI. Conclusion 201
VII. Perspectives 203
1) Généralisation de la méthode de validation 203
2) Compléter l'étude spectrale 204
3) Étude du Sénégal 204
4) Futures missions radiométriques en bande L 205
Annexe 1 : distributions de la SSS à différentes échelles : skewness et kurtosis 207
Annexe 2 : Méthodes infructueuses de détection des courants de surface en utilisant les fronts de SSS 210
1) Méthode 210
2) Résultats 212
Bilan carbone de la thèse 213
Table des illustrations 215
Table des tableaux 220
Bibliographie 221

I. Introduction

La circulation océanique est mise en mouvements par deux sources principales d'énergie : le soleil apporte un flux thermique sur la surface des océans, et la rotation de la Terre crée une force d'entrainement qui dévie les flux. Ces deux forçages ne s'appliquent pas de manière homogène sur toute la surface des océans ce qui engendre des déséquilibres en termes de pression et de densité. Par un effet de retour à l'équilibre, des échanges se mettent en place sous la forme de courants et de mélanges.

La salinité a été classée variable climatique essentielle par l'Organisation Météorologique Mondiale (WMO), car elle influe sur de nombreux aspects de ces échanges. De ce fait, elle joue un rôle crucial dans la circulation océanique globale, car elle modifie la structure verticale en densité de l'océan, impacte les échanges entre l'océan et l'atmosphère, et est très sensible aux flux d'eau douce ce qui en fait un traceur de ceux-ci et des masses d'eaux océaniques. Dans cette introduction je vais donner une définition de la salinité et expliquer plus en détail son importance pour l'océanographie.

1) Définition de la salinité

Je vais dans un premier temps définir précisément ce qu'est la salinité de l'eau de mer.

a. Pourquoi l'océan est-il salé ?

Une première question que l'on peut se poser sur le sel océanique est son origine : pourquoi l'océan est-il salé ?

Bien que nettement moins denses en ions que l'eau de mer, les rivières sont la première source de sel dans l'océan. Elles transportent des minéraux issus de l'érosion des continents, et les rejettent au niveau des embouchures. Les ions constituant le sel marin peuvent également, dans une moindre mesure, être apportés par la circulation atmosphérique et par le volcanisme. En entrant dans l'océan, la concentration d'ions de sel augmente, car ils ne réagissent pas avec les minéraux marins et sont laissés après évaporation. Des analyses sédimentologiques ont

cependant révélé que la salinité des océans est restée relativement constante pendant des millions d'années, les sources de sel sont donc en équilibre avec les puits.
Le sodium, deuxième composant du sel marin, en plus d'un apport fluvial, provient également de l'époque de la formation des océans pendant laquelle une part importante de ses cations a été arrachée au plancher océanique.
La grande quantité de chlore dissoute dans les océans n'est pas due à un apport de rivières mais est due à l'atmosphère primitive de la Terre. On pense que les éruptions volcaniques ont libéré de grandes quantités d'acide chlorhydrique, un gaz qui s'est rapidement dissout dans l'océan.

Le temps de résidence du sodium et du chlore dans l'eau de mer (respectivement 58 et 95 millions d'années) est suffisamment long pour maintenir la stabilité de la quantité totale de sel. Les autres éléments dissous ont un temps de résidence plus court. Le calcium, par exemple, principal élément transporté vers l'océan par les fleuves, est rapidement utilisé pour la croissance des micro-organismes marins, tandis que les algues et les poissons utilisent le magnésium et le potassium pour leur métabolisme.

b. Composition et définitions

Tableau 1 : Composition du sel de mer, en pourcentage.

Ion	*Pourcentage*
Chlorine	55.3 %
Sodium	30.8 %
Sulfate	7.7 %
Magnésium	3.7 %
Calcium	1.2 %
Potassium	1.1 %

L'eau de mer est composée à 96,5 % d'eau et les 3,5 % restants sont principalement composés de matière dissoute. Le constituant majoritaire de cette matière dissoute est le chlorure de sodium, et on trouve également d'autres éléments en plus petites quantités tels que le magnésium, le soufre et le potassium (voir Tableau 1). L'ensemble de ces composants est appelé la salinité de l'eau de mer, qui est définie comme la quantité totale de sels dissous en grammes par kilogramme d'eau de mer.

Au début du 19e siècle, la salinité était déterminée par le poids de matière restante après évaporation. Cette méthode s'est toutefois révélée peu fiable en raison de la perte de certains éléments au cours du processus (Millero et al. 2008).

En 1872-1876, l'expédition Challenger permis de récolter de nombreux échantillons d'eau de mer. A partir de ces échantillons, William Dittmar énonça le principe des proportions constantes, qui postule que les proportions relatives des principaux constituants de l'eau de mer sont à peu près constantes dans l'espace et dans le temps, à l'exception des régions de décharges fluviales. Ce principe a permis de simplifier considérablement la mesure de la salinité, car la mesure d'une seule des matières dissoutes était suffisante. Le chlorure, qui est l'un des composant dominants, a été sélectionné à cette fin. Une formule empirique a été introduite par Knudsen en 1903, utilisant la chlorinité (Cl) pour estimer la salinité :

$$S = 0{,}03 + 1{,}805 * Cl. \qquad \text{(I.1)}$$

La chlorinité est exprimée en grammes de chlore, de brome et d'iode par kilogramme d'eau de mer, en supposant que ces deux derniers éléments sont remplacés par du chlore lors du titrage au nitrate d'argent (Millero et al., 2008).

Cette méthode a ensuite été ajustée par l'UNESCO et permet de définir la salinité absolue, exprimée en g/kg :

$$S = 1.80655 * Cl \qquad \text{(I.2)}$$

Cette méthode est cependant difficile à mettre en place en pratique et à calibrer, et n'est pas particulièrement précise. Elle est également inapplicable dans les régions où la composition de l'eau de mer n'est pas « standard », c'est-à-dire très différente de celle de l'Atlantique nord.

Au fil du temps, la méthode électrique a progressivement supplanté la méthode chimique pour mesurer la salinité. Depuis les années 1960, la mesure de la salinité repose sur une corrélation entre la conductivité électrique d'un échantillon d'eau de mer et la conductivité d'une solution étalon de chlorure de potassium (KCl) ((Cox et al. 1967, Millero et al. 2008), donnée par la formule suivante :

$$S = -0.008 - 0.1692 * K15^{1/2} + 25.3851 * K15 + 14.0941 * K15^{3/2} - 7.0261 * K15^{2} + 2.7081 * K15^{5/2} \quad \text{(I.3)}$$

Avec $K15 = C(s, 15{,}0)/C(KCl, 15{,}0)$

C(s, 15, 0) représente la conductivité d'un échantillon d'eau de mer à une température de 15°C et à la pression d'une atmosphère standard. C(KCl, 15, 0) représente la conductivité d'une solution de KCl avec une fraction massique de 32,4356 g à la même température et pression. Ce rapport K15 prend la valeur de 1 pour une salinité de 35 g/kg.
Cette nouvelle définition correspond à la « Practical Salinity Scale », PSS-78. Cette échelle reste utilisée aujourd'hui comme référence dans les bases de données sur la salinité, et c'est celle que nous utilisons pendant cette thèse.

Cependant, deux défauts ont été trouvés à cette définition. L'eau de mer standard a une salinité pratique de 35 pss mais une salinité absolue de 35,1650 g/kg, et il a été montré que les variations d'éléments dissous dans l'eau de mer, tels que le carbone, les nutriments, et de calcium, peuvent avoir une forte influence sur la salinité. Lors de la 25e réunion de la Commission océanographique internationale en 2009, une nouvelle norme, TEOS-10 (Thermodynamic equation of sea water, 2010), a été proposée pour corriger ces deux imprécisions. Cette norme permet de ramener la salinité pratique exprimée en pss à la salinité absolue exprimée en g/kg, une unité SI qui la rend applicable dans les relations thermodynamiques. On calcule ainsi une salinité de référence Sr :

$$Sr = 35.1650/35 * Sp \quad \text{(I.4)}$$

Enfin, pour prendre en compte les variations d'éléments dissous dans l'eau on procède à un ajustement de la salinité de référence par un coefficient, variant généralement entre 0,02 g/kg en haute mer et 0,09 g/kg dans des régions côtières spécifiques. Ce coefficient est fourni sous forme d'atlas par la norme TEOS-10.

2) Importance de la salinité dans le système océanique

a. Stratification (interactions air-mer et océan de subsurface)

La couche supérieure des océans est caractérisée par une masse d'eau homogène, la couche mélangée, très sensible aux différents forçages extérieurs à l'océan : la pluie, les apports d'eau douce par les fleuves ou les glaces, le vent ou encore les flux de chaleur. Sous la couche de mélange existe un milieu stratifié, composé de couches d'eau de densités variables, les eaux les plus denses étant situées plus en profondeur dans l'océan. Cette densité des masses d'eau est déterminée par trois facteurs principaux, la température, la salinité et la pression.

Le bas de la couche de mélange est caractérisé par un fort gradient de température et de salinité, appelés respectivement thermocline et halocline. De nombreuses méthodes permettent de définir la profondeur de la base de la couche de mélange, basées soit sur des seuils appliqués sur les profils de salinité, température ou densité (Brainerd and Gregg 1995, Thomson and Fine 2003), soit sur des méthodes hybrides plus complexes (Holte et al. 2017).

Cette couche de mélange joue le rôle de tampon entre l'océan profond et l'atmosphère, en intégrant les différents forçages, et en générant des masses d'eau qui se propagent ensuite vers l'océan profond ou en étant le réceptacle d'eaux 'vieilles' se propageant de la subsurface vers la surface de l'océan où elles se retrouvent en contact avec l'atmosphère.

Dans certaines conditions la halocline est située plus près de la surface que la thermocline ce qui engendre une couche intermédiaire entre la couche de mélange et l'océan de subsurface, située entre la halocline et la thermocline, et appelée couche barrière. Cette couche a été observée pour la première fois par Lukas and Lindstrom (1991).

Les couche barrières, présentes presque systématiquement aux faibles latitudes et dans certaines mers arctiques, et localement dans d'autres régions (de Boyer Montégut et al. 2007), créent une frontière marquée que les eaux froides du fond de l'océan ne peuvent pas traverser, ce qui a pour conséquence de limiter les échanges de chaleur entre la surface et l'océan profond (Vialard and Delecluse 1998). Il a été montré qu'elles jouent également un rôle crucial sur la variabilité océanique liée à la mousson indienne (Masson et al. 2005) et pour les évènements El Nino, en contribuant à réchauffer les eaux de surface et en isolant l'effet de coups de vent d'ouest à une couche de surface fine (Guilyardi et al. 2001). La formation de couches barrières peut être attribuée à des facteurs multiples, tels que les fortes précipitations et les apports d'eau douce des rivières (Mignot et al. 2007).

Le rôle de la salinité sur la stratification est donc un sujet important en océanographie. L'étudier permet de déterminer la profondeur de la couche de mélange, et de comprendre la formation de masses d'eau par intégration de forçages extérieurs à l'océan en surface. Cela permet aussi de détecter la présence de couches barrières qui modifient la réponse de l'océan aux forçages atmosphériques. Par exemple, Reul et al. (2021) montrent que la stratification et la profondeur de la couche de mélange jouent un rôle majeur sur la réponse de l'océan aux cyclones tropicaux. Cela permet également de comprendre la propagation des masses d'eau de surface vers le fond, comme par exemple dans l'étude de Da-Allada et al. (2017) qui étudie le rôle de la stratification dans le mélange et la diffusion à la base de la couche de mélange d'eaux dessalées par les pluies et les décharges de fleuve dans le golfe de Guinée.

Sallee et al. (2021) montrent que la stratification des océans est modifiée par le changement climatique. La base de la couche de mélange a tendance à se stratifier de plus en plus, et à être plus profonde, ce qui a pour effet de découpler davantage l'océan profond et la couche de mélange, limiter les échanges entre surface et océan profond, et donc d'atténuer l'effet d'absorption des excès de chaleur et de CO_2 par l'océan.

b. Le rôle de la salinité dans l'évolution des masses d'eau

Par son effet sur la densité de l'eau de mer, la salinité joue un rôle clé dans la création, le déplacement et le mélange des masses d'eau. En effet, de faibles variations de salinité peuvent entraîner de fortes anomalies de densité, au même titre que la température. Un changement de température de 1 ºC génèrera un changement de densité similaire à celui généré par un changement de salinité de 0,11 et 0,44 pss pour les eaux froides (2-3 °C) et chaudes (28-29 °C), respectivement. La salinité a donc une contribution majoritaire sur la densité aux hautes latitudes (Carmack 2007). Ces anomalies de salinité et de température engendrent une anomalie de hauteur dynamique, et influencent donc, par exemple, les courants géostrophiques ou le mélange vertical.

A grande échelle, la circulation océanique principale est la circulation thermohaline, encore appelée circulation méridionale de retournement (MOC, pour 'Meridional Overtuning Circulation', voir Figure I.1). La circulation thermohaline est une circulation globale de masses d'eau, engendrée comme son nom l'indique par les caractéristiques de salinité et de température de l'océan. Elle permet la redistribution de la chaleur dans l'océan, entre les latitudes élevées

peu impactées par le flux radiatif solaire, et les régions tropicales. Les courants de surface, principalement de bord ouest, transportent les eaux chaudes des basses aux hautes latitudes, tandis que les eaux profondes de l'Atlantique Nord et les eaux de fond de l'Antarctique transportent les eaux froides dans la direction opposée. La MOC est principalement déterminée par les gradients horizontaux et verticaux de température et de salinité, ainsi que par l'influence du vent sur la surface océanique.

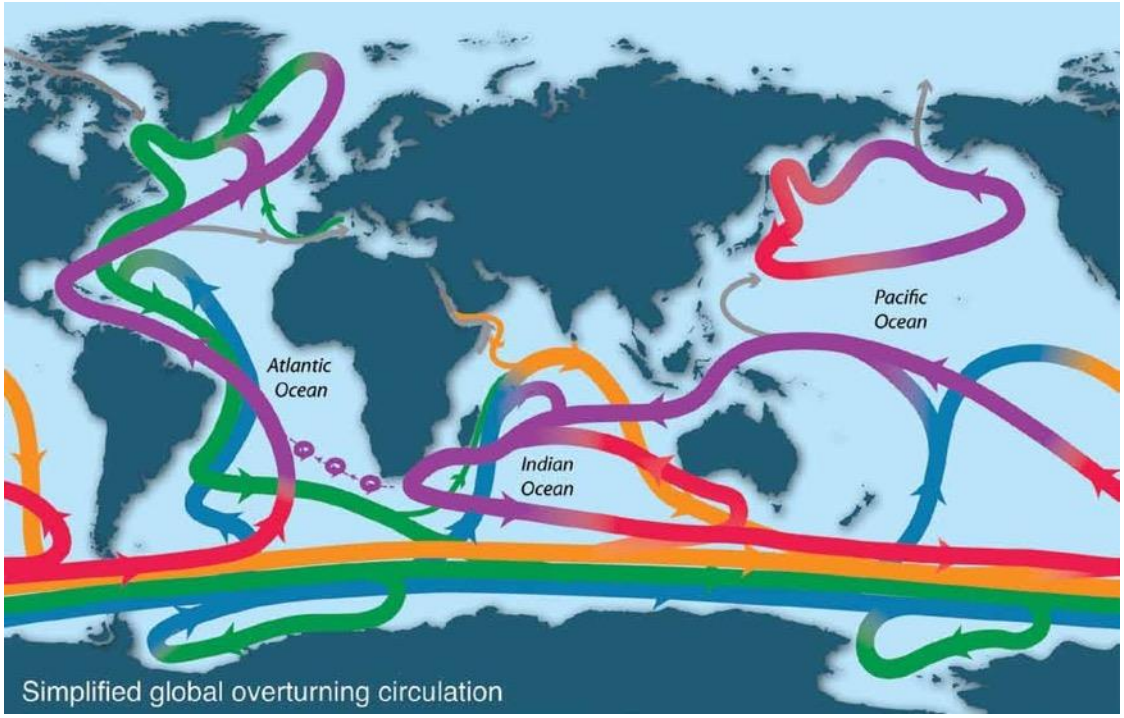


Figure I.1 : La circulation thermohaline (Talley 2013). Violet : océan supérieur et thermocline. Rouge : thermocline plus dense et eaux intermédiaires. Orange : eaux profondes de l'océan Indien et du Pacifique. Vert : eaux profondes de l'Atlantique Nord. Bleu : eaux de fond de l'Antarctique. Gris : composantes du détroit de Béring et apports de la Méditerranée et de la mer Rouge. La largeur des flèches indique leur intensité.

Les masses d'eau sont générées par convection profonde : les eaux de surface, par refroidissement au contact de l'atmosphère (convection thermique) ou par formation de glace de mer et donc rejet de saumure (convection haline), se densifient et deviennent plus lourdes que les eaux de subsurface. Cela entraîne des instabilités convectives telles que décrites par Marshall and Schott (1999), et la plongée de la masse d'eau de surface vers le fond de l'océan. Ce phénomène a lieu en grande partie dans certaines mers de l'atlantique Nord, notamment par convection côtière dans la mer du Labrador (Spall and Pickart 2001). La salinité joue un rôle important dans le processus de convection profonde aux hautes latitudes où son impact sur la densité est déterminant, par exemple dans les mers du Nord, du Labrador, de Weddell et de Ross. La convection des masses d'eau de surface vers le fond joue un rôle important dans le renouvellement des masses d'eau de fond, l'oxygénation et le pompage de carbone :

la moitié du puits de carbone océanique à lieu dans l'Atlantique nord. Avec le réchauffement climatique, cette circulation est suspectée de faiblir à cause de la fonte de la glace et de précipitations accrues aux hautes latitudes qui génèrent des apports d'eau douce importants, et de la diminution de la prise en glaces aux pôles, qui empêche la formation d'eau dense par rejet de saumure (Manabe and Stouffer 1995, Rahmstorf 1995, Lique et al. 2017, Liu et al. 2017, Ditlevsen and Ditlevsen 2023).

De la même manière, à toutes les latitudes, des masses d'eau se forment dans la couche de mélange et impriment les caractéristiques de température et de salinité influencées par l'atmosphère. Ces masses d'eau, en fonction des conditions de stratification, peuvent ensuite être advectées vers le fond.
Par leur influence sur la densité, la température et la salinité impactent de manière active la façon dont les masses d'eau vont ensuite se déplacer, et éventuellement se mélanger à d'autres masses d'eau : elles jouent donc un rôle clé à toutes les étapes de la vie d'une masse d'eau océanique.

c. Traceur des masses d'eau

Au sein de l'océan, la salinité et la température sont des propriétés conservatives de l'eau de mer : ces caractéristiques données par les interactions au contact de l'atmosphère, des fleuves ou de la glace, restent presque constantes, et ne peuvent être modifiées que par mélange avec les eaux rencontrées. Ce n'est pas le cas d'autres propriétés telles que la concentration en oxygène ou en carbone qui peuvent être modifiées par effets chimiques ou biologiques. Ainsi, on peut suivre le déplacement des masses d'eau en observant leur salinité et température, qui sont donc des traceurs en plus d'être acteurs de leurs déplacements. Pour cela, on utilise classiquement des diagrammes T-S (Température Salinité) qui permettent d'identifier les masses d'eau et leur évolution à partir de profils de température et de salinité pris sur la colonne d'eau en différents lieux (Speer and Forget 2013, McDougall and Krzysik 2015, Tailleux 2021). Par exemple, le diagramme T-S présenté en Figure I.2 permet de représenter les profils en dix différents lieux de l'océan atlantique, et d'identifier les masses d'eau par leurs propriétés.

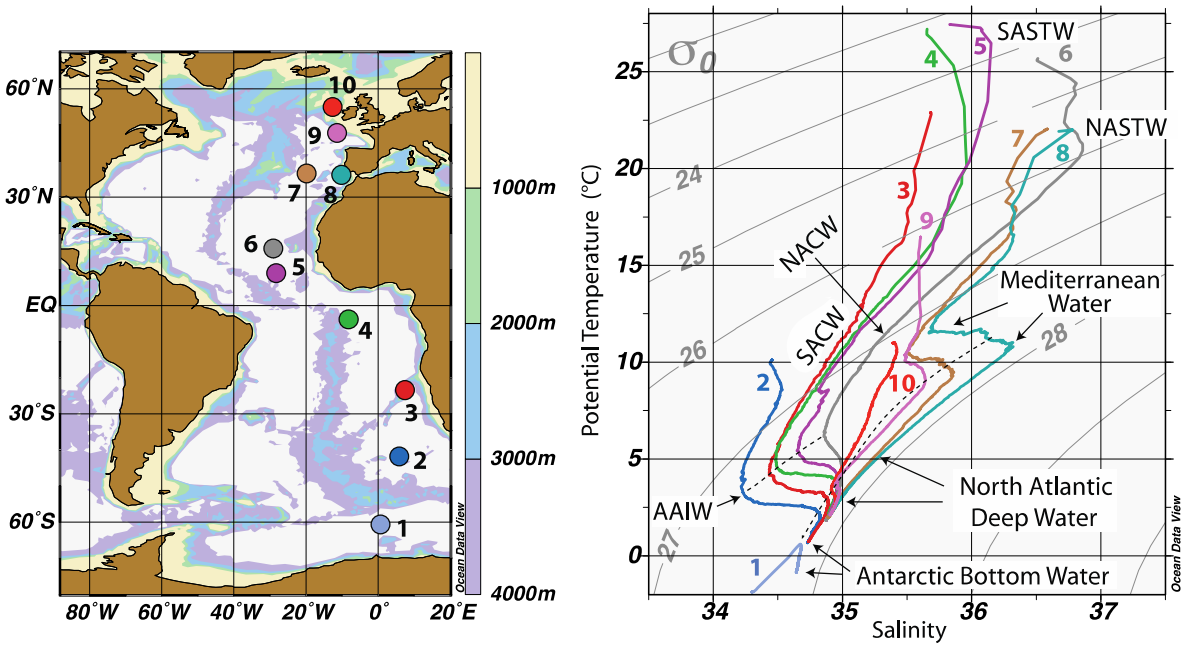


Figure I.2 : Droite : exemple de diagramme T-S dans l'Atlantique aux points décrits sur la carte de gauche, permettant de détecter les masses d'eau (Fieux 2017) NASTW : North Atlantic Subtropical Water, NACW : North Atlantic Central Water, SASTW : South Atlantic Subtropical Water, SACW : South Atlantic Central Water, AAIW : Antarctic Intermediate Water.

3) Importance de la salinité dans le cycle de l'eau

Sur Terre, l'eau évolue en circuit fermé et se déplace dans différents réservoirs, et dans différents états. Ce phénomène cyclique est appelé cycle de l'eau ou cycle hydrologique. Il est alimenté principalement par l'énergie solaire, qui favorise l'évaporation de l'eau et entraîne les autres flux. Ce cycle a une importance cruciale pour les sociétés humaines car il impacte l'accès à l'eau douce, l'agriculture, l'énergie.

La Figure I.3 schématise ce cycle. Les réservoirs dans lesquels l'eau réside sont l'atmosphère, les continents (lacs, rivières et nappes phréatiques), la glace (glaciers, banquise et calottes glaciaires) et les océans, qui représentent 97 % de la totalité de l'eau disponible sur Terre. En termes de flux, les échanges les plus importants se produisent également sur l'océan, 78 % des précipitations y ont lieu et 86 % de l'évaporation totales. Comme ce sont des flux d'eau douce, ils ont un impact direct sur la salinité des océans, ce qui fait de cette propriété de l'eau de mer un traceur du cycle hydrologique. On observe d'ailleurs que la distribution géographique de salinité de surface des océans est très corrélée à la distribution de l'évaporation moins la précipitation (E-P) (voir Figure I.4 et Figure I.5).

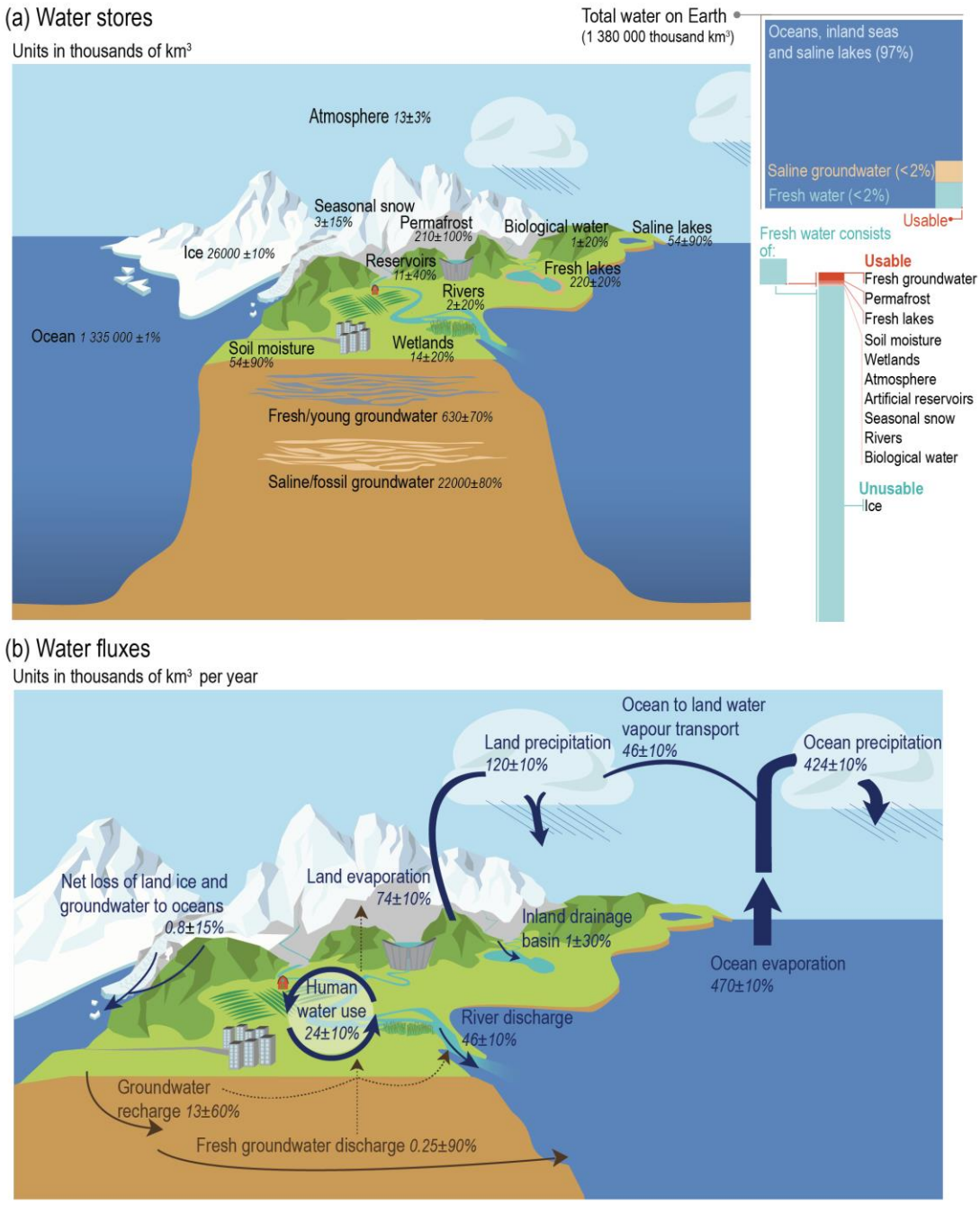


Figure I.3 : Description des réservoirs d'eau (a) et des différents flux composant le cycle de l'eau (b), tiré de (Masson-Delmotte et al. 2021).

a. ITCZ et gyres subtropicales

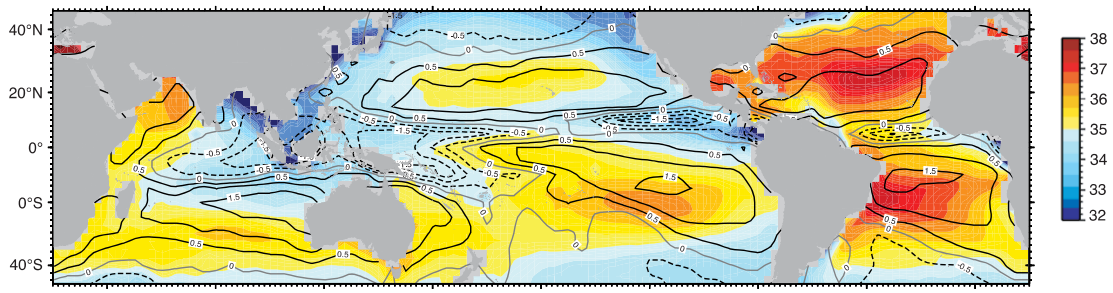


Figure I.4 : Répartition de la SSS moyenne en pss (couleurs) et du terme E-P moyen en m/an (contours) (Gordon et al. 2015).

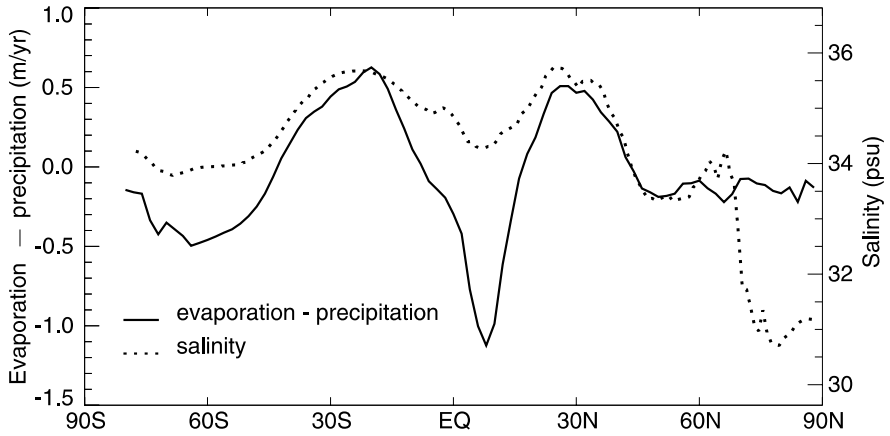


Figure I.5 : Moyenne zonale du terme E-P et de la SSS (Pickard 1964).

La distribution de E-P dans les régions subtropicales est déterminée au premier ordre par la circulation atmosphérique de Hadley : une cellule de circulation atmosphérique qui a lieu entre les régions subtropicales et l'équateur dans chaque hémisphère. Dans cette cellule, les masses d'air s'élèvent autour de l'équateur sous l'effet du rayonnement solaire, se déplacent vers les pôles dans la haute troposphère en se refroidissant, puis descendent dans la zone subtropicale et convergent vers les faibles latitudes à la surface. En surface, les vents tropicaux d'est qui en résultent sont appelés les Alizés.

Ces vents de surface engendrent un régime sec et très évaporatif au niveau des gyres subtropicales, ce qui se traduit par un maximum de SSS (Gordon et al. 2015).

La zone de convergence intertropicale (ITCZ), un centre dépressionnaire marqué par la montée des masses d'air et par des précipitations intenses, est le point de convergence. La position de l'ITCZ et des précipitations qui l'accompagnent changent tout au long de l'année à mesure que la latitude du rayonnement solaire entrant maximal de la Terre se déplace vers

l'hémisphère d'été. En moyenne, il se situe autour de 5°N. Au niveau océanique, à l'équateur, la convergence des Alizés et le changement de signe de la force de Coriolis engendre un transport d'Ekman divergent de l'équateur vers les latitudes plus hautes, et donc une remontée d'eaux froides au niveau de l'équateur.

Ce phénomène est responsable de la variabilité spatiale de la SSS à grande échelle dans l'espace et le temps, à l'échelle d'un bassin océanique et à l'échelle annuelle. Cependant les précipitations, par leur caractère local et leur impact instantané sur la salinité, engendrent également une variabilité à très fine échelle. (Supply et al. 2018, Supply et al. 2020) ont étudié cet impact des précipitations sur la SSS, et ont montré qu'il est possible d'estimer l'occurrence d'un phénomène de précipitation à partir de de données de SSS satellitaire.

b. Fleuves

Le flux d'eau douce vers l'océan issu des rivières est de 46 000 km^3/an, ce qui est nettement inférieur aux précipitations qui sont estimées à 470 000 km^3/an, mais du même ordre que le flux E-P. Ces flux peuvent avoir un impact fort sur l'océan dans la région des panaches car ils sont très locaux et ont lieu par définition près des côtes ; ils peuvent également transporter de grandes quantités de nutriments. Comme on l'a vu précédemment, les décharges de fleuves peuvent aussi être à l'origine de couches barrières en modifiant les interactions océan atmosphère et la stratification de l'océan de surface. En effet l'eau peu salée qui s'écoule des fleuves a tendance à rester en surface, et à s'étendre plus ou moins sous forme de panaches en fonction de la dynamique de l'océan à proximité, ce qui peut créer des gradients de salinité supérieurs à 10 pss entre la surface et 10 m de profondeur.

En créant une couche de surface isolée de la subsurface, les débits de fleuves modifient également les interactions océan-atmosphère dans la région des panaches. Par exemple, les panaches des grands fleuves tropicaux (Orénoque, Amazone) peuvent avoir un impact sur l'intensité et la fréquence des cyclones tropicaux (Reul et al. 2014). Le débit des rivières est également une source majeure de nutriments pour l'océan, jouant un rôle crucial dans la productivité des écosystèmes du plateau (Hickey et al. 2010).

En apportant de grandes quantités d'eau douce dans la couche supérieure de l'océan, les fleuves modifient la salinité de l'océan et donc la dynamique océanique près de la côte. Ils affectent notamment sa densité, impactant ainsi le niveau de la mer le long des côtes par effets

halostérique (Piecuch and Wadehra 2020). Par exemple, sur les côtes Atlantiques des États-Unis et les côtes du golfe du Mexique, une augmentation de 1 km^3 du débit fluvial annuel correspond à une élévation du niveau de la mer allant de 0,01 à 0,08 cm (Piecuch et al. 2018). Le Tableau 2 représente les débits moyens des 10 principaux fleuves mondiaux et des deux fleuves les plus importants de la région étudiée dans cette thèse, le Sénégal et la Gambie.

Tableau 2 : superficie de drainage et débit moyen des plus grands fleuves mondiaux et des deux principaux fleuves d'Afrique de l'Ouest (Wohl and Lininger 2022).

Nom	*Superficie de drainage (km^2)*	*Débit moyen (m^3/s)*
Amazone	6 915 000	219 000
Congo	3 680 000	41 000
Yangtze	1 800 000	31 900
Orénoque	880 000	30 000
Rio Paraná	3 100 000	25 700
Ienissei	2 580 000	19 600
Brahmapoutre	1 730 000	19 200
Léna	2 490 000	17 100
Rio Madeira	850 000	17 000
Mississippi	2 980 000	16 200
Sénégal	337 000	647
Gambie	77 054	162

L'intensité des débits de fleuves est dépendante globalement de l'importance des précipitations sur les bassins versants correspondants, ou de la quantité d'eau issue de la fonte d'eau solide. Ainsi, les débits sont souvent très saisonniers : c'est le cas par exemple de l'Amazone, où le débit est plus de deux fois plus important en Mai (276 000 m^3/s) qu'en Novembre (124 000 m^3/s). Ce n'est pas le cas par contre du fleuve Congo, qui conserve un débit presque constant tout au long de l'année. Cependant, les anomalies interannuelles de ces débits peuvent atteindre des ordres de grandeur similaires à la variation saisonnière sur des évènements ponctuels. Chandanpurkar et al. (2022) montrent une forte anomalie de niveau de la mer reliée à ces anomalies de débits de fleuves dans les rivières les plus importantes.

Dans cette thèse, je m'efforcerai de déterminer l'impact de la variabilité des débits de fleuves sur la salinité.

Le cycle de l'eau a tendance à évoluer avec le changement climatique. Il y a en effet une forte dépendance non linéaire de la pression de la vapeur saturante d'eau (capacité de rétention de l'humidité) par rapport à la température. L'atmosphère, plus chaude, peut contenir plus d'eau sous forme gazeuse, ce qui accentue les flux et engendre des précipitations plus intenses (Durack and Wijffels 2010, Terray et al. 2012, Yu et al. 2020). Ce changement est très préoccupant, car il a de profondes répercussions socio-économiques dans le monde entier.

4) La mesure de la salinité

Les méthodes permettant la mesure de la salinité se sont diversifiées au fil du temps. Actuellement, on peut distinguer deux principales méthodes de mesure de la salinité, la mesure *in situ* qui permet des résolutions spatiales très fines, en surface ou en profondeur, mais qui sont par définition très localisées, et la mesure satellitaire qui à l'inverse donne une visualisation globale de la salinité, mais est limitée à la couche de surface et à une moins bonne résolution spatiale. Je décris ci-dessous les principaux capteurs qui permettent cette mesure de la salinité.

a. Mesure *in situ*

Comme on l'a vu dans le chapitre précédant, la détermination de la salinité *in situ* repose aujourd'hui sur la mesure de la conductivité de l'eau de mer. Les capteurs de salinité *in situ* permettent de mesurer la salinité à différentes résolutions temporelles et spatiales, et plus ou moins proches de la surface. Les principaux vecteurs mis en œuvre sont recensés ci-dessous, et une description plus détaillée de capteurs *in situ* utilisés pendant cette thèse sera donnée dans la partie II.2).

Les sondes de conductivité, de température et de profondeur (CTD) permettent de mesurer les trois variables susmentionnées. Ces instruments produisent des profils verticaux à partir de trois mètres sous la surface, et son déployés depuis des navires océanographiques. Les sondes sont reliées à un ordinateur sur le bateau par le biais de câbles conducteurs, ce qui permet de visualiser les données recueillies sur un écran. Généralement les CTD sont accompagnées de

rosettes qui permettent le prélèvement d'échantillons d'eau à différentes profondeurs, et de procéder à des analyses chimiques de ces échantillons.

Les mouillages sont des bouées ancrées sur lesquelles on installe une série de capteurs à diverses profondeurs, et auxquelles on peut associer des capteurs atmosphériques. Ils offrent la capacité de collecter des données diverses, notamment de température et de salinité, à différentes profondeurs pendant de longues périodes allant du mois à des années. Ces données peuvent être enregistrées avec une résolution temporelle d'une heure, voire supérieure. Plusieurs réseaux de mouillages ont été installés et maintenus dans différents océans. On peut noter le réseau de mouillages PIRATA (Prediction and Research Moored Array in the Tropical Atlantic) dans l'Atlantique tropical, pour lequel j'ai participé à une campagne de relèvement annuel des mouillages pendant cette thèse.

Les profileurs ARGO sont des instruments autonomes alimentées par batterie qui mesurent la température et la salinité à plus de 2 000 mètres de profondeur jusqu'à la surface de l'eau. Ils fonctionnent par cycles : depuis la surface, ils ajustent leur flottabilité pour plonger jusqu'à une profondeur fixe à laquelle il dérive, puis continuent la descente jusqu'à atteindre une profondeur maximale. Ils augmentent alors leur flottabilité par un effet de ballasts pour remonter à la surface où ils transmettent les mesures collectées par GPS à un réseau satellite. On recense aujourd'hui environ 3000 flotteurs ARGO. Certains (les deep-ARGO) permettent d'échantillonner l'océan à plus grande profondeur, jusqu'à 4000 m.

Les thermosalinographes (TSG) sont des capteurs de salinité et de température fréquemment installés sur les entrées d'eau des navires de recherche et des navires d'opportunité tels que les bateaux de commerce ou de plaisance. L'intérêt de ces appareils réside dans leur capacité à prendre des mesures en continu et à une bonne résolution spatiale (elles sont généralement espacées d'environ 1km) le long des trajets des bateaux qui les embarquent. La prise d'eau permettant ces mesures est généralement située entre 5 et 15 m de profondeur sur les bateaux marchands ou les navires océanographiques, à une profondeur moindre sur les bateaux de plaisance.

D'autres vecteurs viennent compléter cet échantillonnage, tels que les planeurs sous-marins, véhicules autonomes qui peuvent prendre des mesures le long d'un parcours prédéterminé, les

bouées dérivantes qui suivent les courants marins, ou bien les capteurs fixés sur les animaux marins qui permettent d'acquérir des données dans des régions polaires très difficiles d'accès.

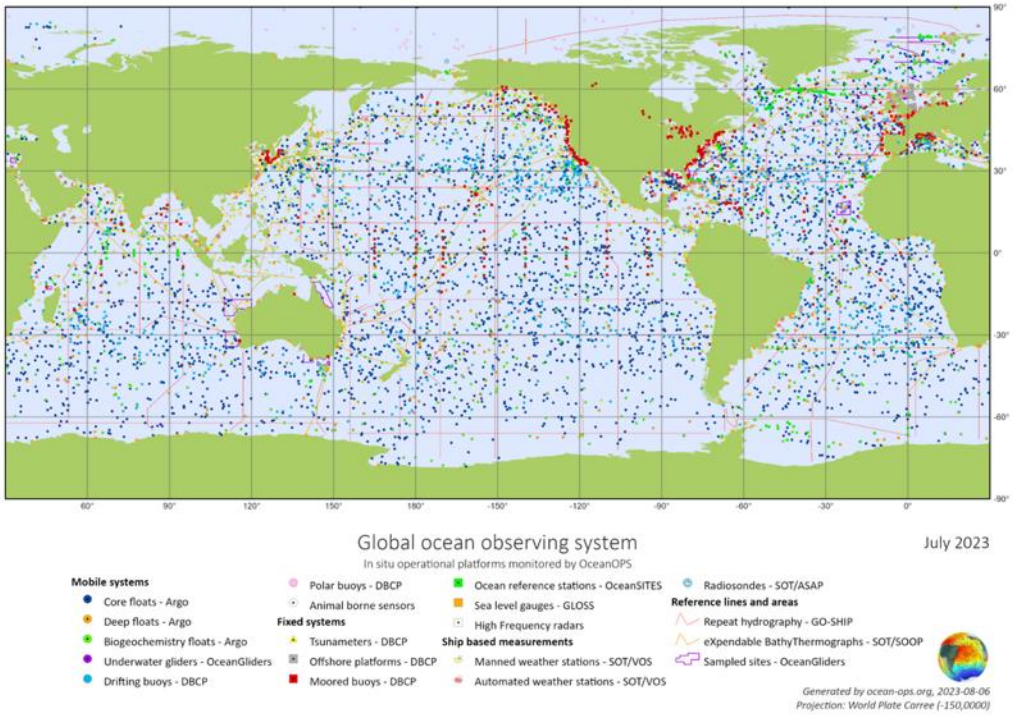


Figure I.6 : Données in situ disponibles au mois de Juillet 2023 (tiré de ocean-ops.org).

La Figure I.6 montre la répartition des principales mesures *in situ* prises en juillet 2023. Comme on l'a vu plus haut, l'intérêt principal de ces mesures est leur très bonne résolution à une échelle locale et l'accès à l'océan profond. Cependant, comme on peut le voir, malgré le déploiement de nombreux vecteurs et une couverture de plus en plus complète de la surface océanique, ces données *in situ* ne permettent pas d'avoir une vision globale de l'océan : les vecteurs ne sont pas répartis de manière homogène, avec une forte concentration près des côtes et dans l'hémisphère nord, et une très faible concentration aux hautes latitudes. Les flotteurs et bouées dérivantes sont également dépendantes des zones de convergences et de divergences océaniques. Les données *in situ* ne permettent en général pas de connaître la salinité à l'extrême surface de l'océan, ce qui rend difficile la comparaison aux données satellites (Figure I.7).

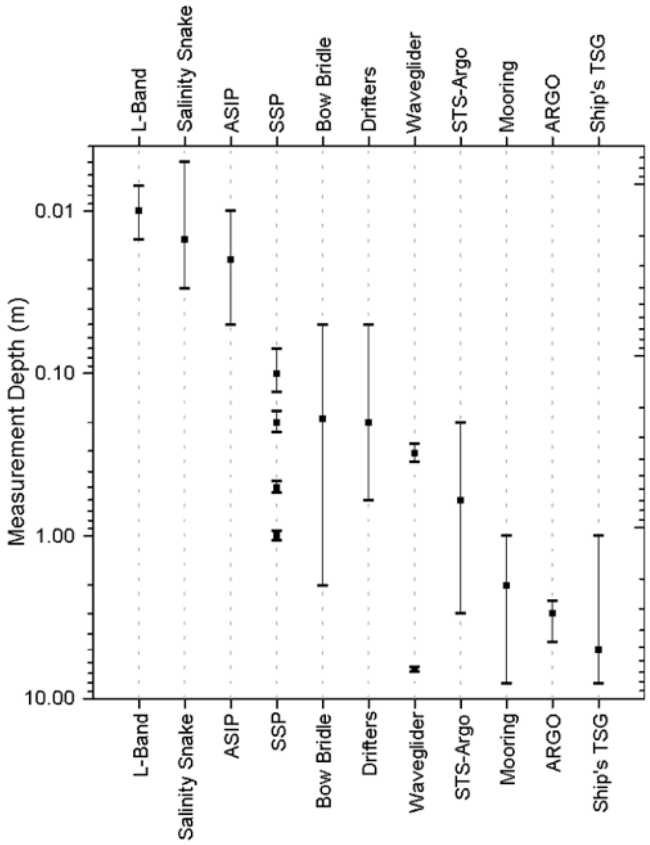


Figure I.7 : profondeurs de prise de mesures pour les différents instruments mesurant la salinité.ASIP : Air–Sea Interaction Profiler; SSP : Surface Salinity Profile; STS : Surface Tempertaure Salinity sensor; TSG : Thermosalinographes

Avec un espacement moyen d'environ 3° entre chaque mesure ARGO, on peut cependant estimer un champ de salinité projeté sur une grille, par un procédé d'analyse objective. C'est ce que propose le produit ISAS (Kolodziejczyk et al. 2017), décrit dans la section II.2).

b. Mesure satellitaire

La mesure satellitaire de la salinité, mise en œuvre depuis 2010, permet de pallier ce manque de résolution à l'échelle globale. Cette mesure de la salinité depuis l'espace repose sur le principe de la radiométrie en bande L, une mesure passive de l'émission de la surface des océans à la fréquence de 1.4 GHz. Cette longueur d'onde est indirectement corrélée à la permittivité de l'eau de mer, ce qui permet par un processus d'inversion d'en déduire sa salinité. La méthode de mesure par radiométrie en bande-L sera décrite en détail dans la partie II.1).

De nombreuses contaminations sont à prendre en compte, telles que les modifications du signal liées à la traversée de l'atmosphère, l'émission de signaux par la galaxie, par le soleil, la rugosité de la surface de l'eau, la température, la présence d'écume. Les corrections de ces

contaminations, parce que souvent imparfaites, sont sources d'incertitudes auxquelles s'ajoutent d'autres perturbations telles que les interférences radio (RFI). On estime cependant l'incertitude sur la mesure satellitaire en moyenne hebdomadaire à environ 0.2 pss (voir carte des erreurs moyennes de la salinité satellitaire CCI : Figure II.5).

Trois missions spatiales ont été lancées jusqu'à présent dans le but de mesurer la SSS. Elles utilisent toutes les trois un radiomètre en bande L (1.4GHz) :

- SMOS (Soil Moisture Ocean Salinity) (Kerr et al. 2010), lancée en 2010 par l'ESA, est la première mission spatiale permettant la mesure de la SSS sur les océans ainsi que celle de l'humidité des sols sur les surfaces continentales. Elle est toujours en fonctionnement, fournissant la plus longue série de SSS satellitaires jamais obtenues (>14 ans). Grâce à la technique interférométrique, la résolution moyenne dans le champ de vue est de 43 km, et le temps de revisite moyen est de 3 jours. Ces bonnes résolutions spatiales et revisite temporelles sont obtenues au détriment de la précision sur une mesure individuelle, de l'ordre de 0.6 pss dans les tropiques.
- Aquarius (Lagerloef et al. 2013) a été lancé en 2011 et s'est arrêté en 2015. Sa résolution varie entre 80 et 140 km, avec un temps de revisite de 7 jours. L'intérêt de cet instrument est sa précision (0.2 pss sur une mesure individuelle), mais sa résolution spatiale ne permet pas de détecter les forts gradients ou les structures tourbillonnaires.
- SMAP (Entekhabi et al. 2010) a été lancée en 2015, équipé d'une grande antenne rotative, il fournit des données à une résolution semblable à celle de SMOS : 43 km, avec un temps de revisite à 8 jours et une précision proche de celle de SMOS, avec moins de contaminations RFI et à l'approche des côtes.

Par une méthode d'analyse objective, on peut combiner les mesures des trois missions satellitaires décrites ici ; c'est le principe des champs de niveau 4 de SSS intégré dans le projet Climate Change Initiative (CCI) de l'ESA. La méthode nécessite une estimation des erreurs de représentativité liées à la résolution, et de la variabilité manquée des différentes mesures. Une des contributions de cette thèse a été de fournir cette estimation pour permettre cette analyse objective.

Une description plus détaillée de ces capteurs et des champs de salinité qui en sont déduits sera donnée dans la section II.1).

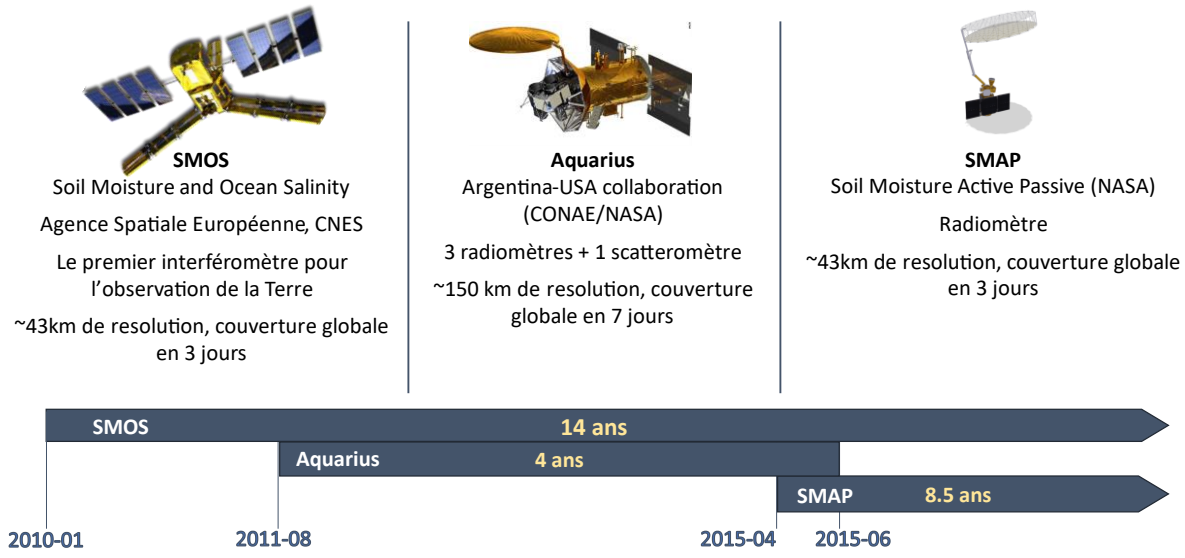


Figure I.8 : les différentes missions d'observation de la SSS depuis l'espace, et la couverture temporelle des données.

Les observations satellites, par leur couverture spatiotemporelle sans équivalent et une série temporelle qui dépasse maintenant 14 ans, sont de grande valeur pour l'observation des évènements océaniques de grande échelle spatiotemporelle. L'observation de la mésoéchelle ou sub-mésoéchelle par la salinité satellitaire reste cependant un défi. La résolution de 50 km des champs actuels rend difficile l'observation des fronts, tourbillons ou filaments ou de tout autre phénomène de dimension spatiale inférieure à 100 km. La mesure satellitaire est en outre sujette à de nombreuses incertitudes de différentes origines, telles que l'incertitude liée au capteur lui-même et sa précision radiométrique, l'incertitude due à l'algorithme d'inversion de la salinité, ou des incertitudes physiques liées au milieu observé qui influence le signal (vent, RFI, contamination par la côte, etc). Cela rend la mesure satellitaire dans des conditions non idéales, comme près des côtes ou des glaces, plus complexe et plus incertaine. Un autre inconvénient de la mesure satellitaire est sa limitation au premier centimètre de l'océan, qui rend l'étude des processus verticaux impossible.

Les mesures *in situ* permettent donc l'observation à une très bonne résolution de phénomènes océanographiques et d'accéder à l'océan profond, mais ne fournissent que des observations très localisées, tandis que les satellites fournissent une vision globale de l'océan sans toutefois atteindre les structures océaniques fines et avec quelques limitations dans certaines régions. Pour complémenter ces deux méthodes de mesure, on peut avoir recours à la modélisation numérique de l'océan. La modélisation consiste à résoudre un système simplifié d'équation

résolvant la dynamique océanique. Les modèles peuvent être forcés, par des données auxiliaires, couplés à des modèles atmosphériques, ou assimiler des observations. Ces méthodes permettent d'accéder à la salinité (et à toutes autres variables) en tout point du globe, mais sont très dépendantes du modèle utilisé. Dans cette thèse, j'utilise une réanalyse combinant modèle et données *in situ* et les résultats de plusieurs simulations numériques. Ces modèles seront présentés dans la section II.3).

5) Que sait-on de la variabilité de la salinité ?

On l'a vu (Figure I.4), la répartition de SSS à l'échelle globale est très corrélée aux flux d'eau à la surface des océans, ce qui en fait une variable d'intérêt pour observer le cycle de l'eau planétaire. La SSS est, comme évoqué dans la partie I.1.c, une valeur conservative des masses d'eau, sa distribution spatiale est donc également influencée par la circulation océanique. La variabilité spatio-temporelle de la salinité dépend donc principalement de la variabilité des flux d'eau entrant et sortant dans l'océan, et des variabilités engendrées par la circulation océanique. Ainsi, la salinité varie saisonnièrement autour de l'équateur en suivant la variation de la position de l'ITCZ (ex : (Reverdin et al. 2007). De même, la variabilité saisonnière de la SSS est corrélée à celle des débits des fleuves importants au niveau de leurs panaches, cela a été étudié par exemple pour le cas de l'Amazone par Dessier and Donguy (1994).
En général, les anomalies de salinité observées ne sont cependant pas le résultat d'une simple contribution mais de plusieurs phénomènes intriqués. Il en est ainsi de l'anomalie liée à l'ITCZ, qui est advecté par transport d'Ekman (Yu 2015), ou des anomalies de SSS liées aux panaches de fleuves, qui sont entre autre fortement modulés par les effets de mélange verticaux ou d'advection verticale ou horizontale (Da-Allada et al. 2014, Houndegnonto et al. 2021). Hasson et al. (2018) ont également étudié le cas particulier d'une forte anomalie de SSS expliquée par l'effet combiné d'un phénomène El-Ninõ et d'une advection très forte vers le Pacifique Nord.

Les évènements océaniques décrits ci-dessus correspondent à des échelles de variabilité spatiotemporelles larges, ce qui les rend observables à l'aide des champs de SSS dérivés des mesures satellitaires dont la résolution est de l'ordre de 50 km et de 7 jours (pour atteindre une précision de l'ordre de 0.2 pss). C'est également le cas des ondes d'instabilité équatoriales (Lee et al. 2014, Yin et al. 2014) , dont les données satellitaires ont permis de détecter la variabilité en SSS associée.

Les missions satellitaires mesurant la SSS ont fourni des mesures depuis maintenant plus d'une décennie et complètent avec une couverture synoptique les études faites à partir de mesures *in situ* (Vinogradova and Ponte 2017, Reul et al. 2020, Boutin et al. 2023). Néanmoins les mesures satellitaires actuelles, de par leur résolution spatiale, ne permettent pas de rendre compte de phénomènes à plus fine échelle spatiotemporelles, telles que les évènements de sub-mésoéchelle ou de mésoéchelle océanique à haute latitude.

Cette gamme de phénomènes océaniques est constituée des tourbillons, fronts ou filaments, qui sont omniprésents dans l'océan. La taille de ces processus est déterminée par le rayon de déformation de Rossby, qui dépend lui-même de la force de Coriolis, et peut varier de centaines de kilomètres dans les tropiques à quelques kilomètres aux hautes latitudes (Chelton et al. 1998). Ces processus représentent une part conséquente de l'énergie cinétique de l'océan (Ferrari and Wunsch 2009) et ont un impact important : ils participent au brassage des masses d'eau, peuvent piéger et transporter des poches d'eau à travers les bassins océaniques, influent sur la profondeur de la couche de mélange (Gaube et al. 2019), et modifient ainsi les interactions océan-atmosphère (Chelton et al. 2001). Ces évènements sont mal représentés par les modèles, actuellement mal estimés également à partir des mesures satellitaires notamment à haute latitude, et pourtant représentent une contribution forte aux transports de sel et de chaleur dans l'océan (Melnichenko et al. 2021).

Les processus liés aux flux d'eau douce à la surface de l'océan engendrent également une forte variabilité de la SSS aux échelles spatiotemporelles fines, en plus d'une forte stratification. En effet ils sont à l'origine de poches d'eau douce qui subsistent en surface et engendrent des fronts importants à l'interface entre ces poches et le milieu environnant.

Ainsi les observations satellitaires de la SSS sont pour le moment de grande utilité pour les structures océaniques supérieures à la mésoéchelle, mais l'impact de la variabilité des flux d'eau douce sur la salinité de surface reste mal connu, et l'information sur les échelles inférieures reste inaccessible par ce type de mesure. Plusieurs études ont cherché à combler ce manque et se sont intéressées à la caractérisation des variabilités de la salinité aux échelles inférieures à la mésoéchelle. On peut citer par exemple D'Addezio et al. (2019) et Bingham et al. (2021), qui ont cherché à quantifier la variabilité à différentes échelles, dans des régions choisies, à partir de simulations à haute résolution. Des études spectrales ont également permis de quantifier l'énergie dans les hautes fréquences spatiales grâce à des mesures de TSG le long de trajets bateaux (Kolodziejczyk et al. 2015).

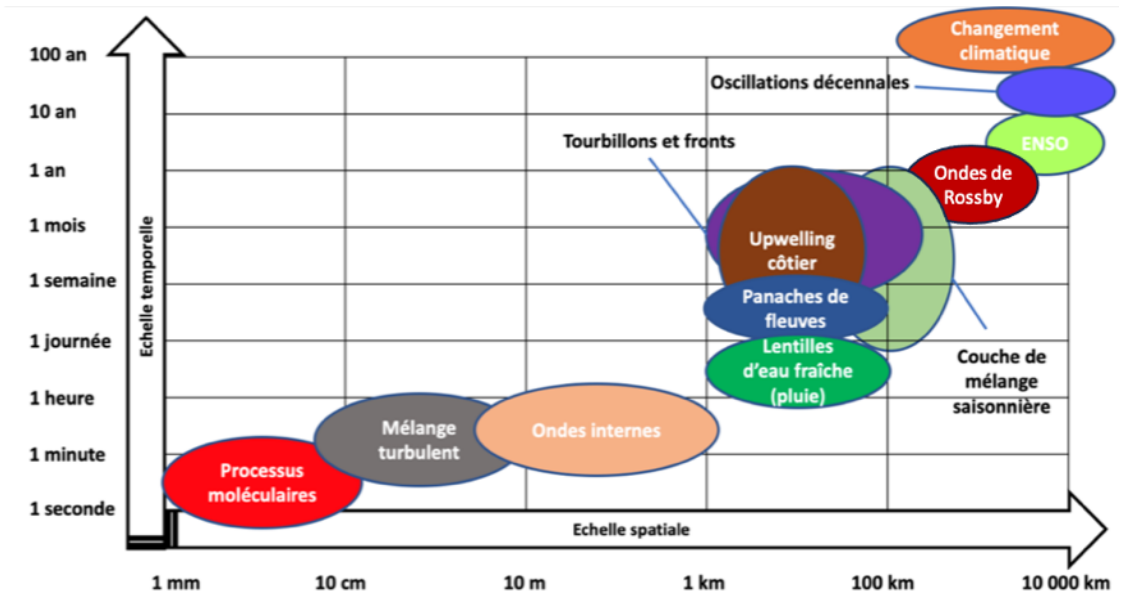


Figure I.9 : Échelles spatiotemporelles des différents processus océaniques (Dickey and Bidigare 2007, Supply 2020)

6) But de la thèse et plan

Dans cette thèse, je m'intéresse particulièrement à la variabilité de la salinité, en particulier la SSS satellitaire, et au lien entre la variabilité de la salinité et celle des flux d'eau douce. La variabilité de la salinité aux échelles non résolues par les instruments satellitaires actuels est intéressante à estimer à plusieurs égards :

- Les analyses objectives combinant les SSS de plusieurs missions satellitaires nécessitent des informations sur la variabilité entre les résolutions des champs de SSS issus des différentes missions.
- La validation des SSS satellitaires se base sur des comparaisons à des SSS *in situ*, et une part des différences peut provenir de la différence de résolution spatiale des données comparées et des effets liés à une colocalisation spatio-temporelle imparfaite.
- Une bonne connaissance de la variabilité aux fines échelles permettra de mieux définir les besoins en termes de résolution des futures missions d'observation de la salinité par satellite.

Dans un premier temps je chercherai à estimer la variabilité sous la résolution satellitaire de la salinité à l'échelle globale, en utilisant des données issues de modèles océaniques. Je chercherai ensuite à clore le budget de l'erreur satellitaire afin de mieux interpréter les différences observées entre SSS satellitaire et SSS *in situ* en estimant la part des différences observées qui

peut être expliquée par la variabilité de la SSS à l'intérieur des pixels satellitaires. Je présenterai également une étude spectrale en trois dimensions à partir d'un modèle océanique à haute résolution, qui permettra de visualiser les échelles qu'il serait utile de capter dans le cadre d'une future mission satellite.

Je m'intéresserai ensuite au lien entre les variabilités de flux d'eau douce et la variabilité de la SSS. Je traiterai un cas particulier au voisinage de la côte bordant l'Afrique du Nord-Ouest, où l'on observe des débits importants de fleuves et l'influence de l'ITCZ. Cette région bénéficie d'un focus particulier au LOCEAN grâce à une coopération entre les équipes françaises et sénégalaises qui participent au Laboratoire Mixte International Eclairs2. Un mouillage (bouée Melax) est notamment maintenu par le LOCEAN au large de Dakar. Le modèle CROCO-PISCES est utilisé pour interpréter les mesures *in situ* dans la région (Melax, Argo, bateaux) et étudier les processus physiques et biogéochimiques en jeu. Une des grandes incertitudes du modèle provient du manque d'information pour forcer les débits des fleuves. Je chercherai dans cette deuxième partie à étudier les liens entre les débits de fleuves et la variabilité de la salinité dans la région, en particulier l'importance de la variation interannuelle des débits sur la salinité et la circulation océanique.

Le plan de ce manuscrit est le suivant : dans le chapitre II succédant à cette introduction je décrirai les données et méthodes utilisées pendant cette thèse. Je développerai le travail sur la variabilité de la SSS sous la résolution satellitaire à l'échelle globale dans le chapitre III. J'étudierai les résultats de l'étude spectrale en 3 dimensions et l'intérêt d'une mission satellitaire haute résolution dans le chapitre IV. Le chapitre V sera dédié à l'étude des interactions entre flux d'eau douce et salinité dans la région du Sénégal-Mauritanie, et je donnerai les conclusions dans le chapitre VI et les perspectives à ce travail dans le chapitre VII. Les chapitres III et V seront articulés autour de deux publications scientifiques respectivement publiées et en préparation.

II. Données et méthodes

Dans cette partie, je vais décrire les données et les méthodes qui ont été utilisées ou auxquelles j'ai contribué pendant ce travail de thèse.

La donnée centrale des travaux présentés est la mesure satellitaire de SSS. J'ai par ailleurs utilisé plusieurs jeux de données *in situ* et j'en ai collecté certaines dans le cadre d'une campagne en mer. Sur l'ensemble de ma thèse, j'ai eu recours à des simulations de modèles océaniques ainsi qu'à des estimations des précipitations et des décharges de fleuves pour l'étude régionale en Afrique de l'Ouest.

1) La mesure satellitaire de la SSS par radiométrie en bande L

Au cours de cette thèse, je me suis particulièrement intéressé aux mesures satellitaires de la SSS obtenues par radiométrie hyperfréquence. Je décris ci-dessous le principe de cette mesure.

a. Principe de la mesure

Le principe physique de l'estimation de la SSS par radiométrie consiste à mesurer de manière passive la puissance éléctromagnétique émise par l'océan. Cette puissance, comme on va le voir ci-dessous, est reliée à la permittivité de l'océan (ou constante diélectrique), qui dépend essentiellement de la température et à basse fréquence de la salinité de l'eau.

La puissance émise par l'océan et reçue par le capteur, par unité d'angle solide et de surface, est appelée la brillance (B), donnée en $W.sr^{-1}m^{-2}$. Cette brillance peut être définie en termes de température de brillance (Tb), qui représente la température à une certaine fréquence ν qu'aurait un corps noir, qui par définition absorbe toute l'énergie qu'il reçoit, émettant la même brillance que le corps considéré. Cette température de brillance s'exprime en °K, et correspond à la température physique de l'objet multipliée par son émissivité e. Dans le cas de l'océan :

$$T_b = e.SST \tag{II.1}$$

En notant SST la température de surface de l'océan.

L'émissivité est un paramètre de l'eau qui caractérise sa capacité à émettre de l'énergie, et donc l'éloignement de son comportement de celui d'un corps noir. Considérant que l'océan est à l'équilibre thermodynamique, il émet autant d'énergie qu'il en absorbe, ce qui permet de relier l'émissivité au coefficient de réflexion de l'eau :

$$e = a = 1 - R \tag{II.2}$$

Avec a la fraction de puissance incidente absorbée par l'océan, R le coefficient de réflexion à la surface.

Dans le cas d'une surface plane, le coefficient de réflexion est donné pour les polarisations verticale et horizontale par les coefficients de Fresnel, et dépend de la permittivité relative de l'eau par rapport au vide ε_r et de l'angle d'incidence θ :

$$R_v = \left| \frac{\varepsilon_r \cos\theta - \sqrt{\varepsilon_r - \sin^2\theta}}{\varepsilon_r \cos\theta + \sqrt{\varepsilon_r - \sin^2\theta}} \right|^2 \tag{II.3}$$

Et

$$R_h = \left| \frac{\cos\theta - \sqrt{\varepsilon_r - \sin^2\theta}}{\cos\theta + \sqrt{\varepsilon_r - \sin^2\theta}} \right|^2 \tag{II.4}$$

On peut donc, par le biais des coefficients de Fresnel, relier la permittivité de l'océan considéré comme une surface plane à sa Tb, appelée Tb_{flat}. On relie ensuite la permittivité aux paramètres physiques de l'eau tels que sa salinité et sa température par le biais d'un modèle de constante diélectrique, décrit plus bas.

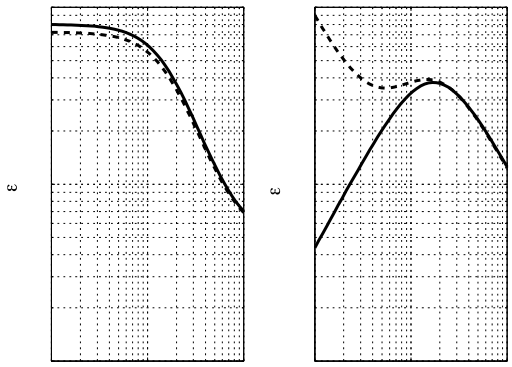


Figure II.1 : sensibilité de la permittivité de l'eau de mer à la SSS, pour une SST de 20°C (Dinnat 2003). Gauche : partie réelle, Droite : partie imaginaire.

La sensibilité à la SSS de la permittivité ε dépend de la longueur d'onde considérée. D'après la Figure II.1, plus la fréquence est basse, plus la sensibilité de ε à la SSS est importante, la mesure de la SSS sera donc d'autant plus précise que la fréquence est basse. Cependant, plusieurs facteurs limitent le choix de la bande de fréquence : d'un point de vue de la faisabilité de l'instrument, plus la fréquence est basse et plus l'antenne nécessaire pour capter le signal est longue, il faut donc faire un compromis entre la taille de l'antenne et la résolution des mesures. D'autre part, le signal en salinité étant faible, il faut se prémunir au maximum des sources de pollutions, il est donc nécessaire de sélectionner une fréquence protégée des activités humaines. La bande L, à une fréquence $\nu = 1.4\ GHz$, a été choisie pour la mesure de la salinité pour ces raisons. Elle permet en outre de limiter l'effet Faraday sur le signal et est relativement peu impactée par la présence d'eau dans l'atmosphère, les mesures restant possibles malgré la présence de nuages.

Le modèle décrit ci-dessus est valable pour une mer plate et pour un signal soumis à aucune pollution. Ce modèle n'est pas réaliste, et quelques modifications doivent être apportées à cette estimation, résumées dans la Figure II.2.

- L'océan n'étant pas une surface plane, sa rugosité va également influer sur son émissivité. La rugosité de l'océan dépend principalement du vent local qui engendre la mer du vent, et du vent distant qui génère de la houle. Le vent fort peut également entraîner l'apparition d'écume, qui modifie également l'émissivité de l'eau. Ainsi, une partie de la

température de brillance reçue par le capteur provient des effets de rugosité, cette partie est appelées Tb_{rough}. Une partie de la Tb provient de l'écume et est appelée Tb_{foam}.

Une modélisation de ces effets liés à la rugosité a été établie par Dinnat (2003). Ce modèle se base sur une observation statistique de la houle, construite à partir d'un spectre de surface de mer. Reul and Chapron (2003) ont proposé une estimation de l'impact de l'écume sur le signal, qui dépend principalement de l'épaisseur et du type d'écume.

- Le signal est également modifié et atténué par sa traversée de l'atmosphère. En effet, les composés chimiques de l'atmosphère (essentiellement l'O_2) absorbent et émettent de l'énergie dans la bande L. Il en résulte trois perturbations du signal par l'atmosphère : une température de brillance liée aux émissions de l'atmosphère vers le bas, nommée Tb_{atm_dn}, et vers le haut, nommée Tb_{atm_up} ainsi qu'une atténuation des signaux provenant de la surface par un coefficient $e^{-\tau_{atm}}$. Ces effets sont dépendants de la pression atmosphérique et de la composition de l'atmosphère traversée, l'effet majeur étant dû au dioxygène atmosphérique.

Lors de sa traversée de l'ionosphère, le signal subit également la rotation de Faraday, qui modifie sa polarisation. Cet effet est relativement faible en bande L mais doit être pris en compte dans ce modèle. Le contenu total en électrons de l'ionosphère sous le satellite (Total Electron Content, TEC) est estimé à partir des mesures SMOS et permet d'évaluer l'impact de l'ionosphère sur le signal (Vergely et al. 2014).

- Des pollutions extraterrestres viennent s'ajouter à cette liste. La galaxie émet à la longueur d'onde de la bande L, et engendre une pollution galactique Tb_{gal}. Cette pollution peut être estimée à l'aide d'un modèle galactique, en fonction d'une carte d'émission du ciel. Le soleil est également une très forte source d'émission en bande L. L'effet de la réflexion du soleil à la surface de la mer (sun glint) sur la mesure de la Tb par satellite a été décrit en détail par Reul et al. (2007) et Dinnat and Le Vine (2008)

Ainsi la formulation totale de la Tb atteignant le capteur du satellite est :

$$T_b = \left[\left(T_{b_{flat}} + T_{b_{rough}}\right)(1-F) + FT_{b_{foam}} + T_{b_{atm_dn}} + T_{b_{gal}} + T_{b_{sunglint}}\right] e^{-\tau_{atm}} + T_{b_{atm_up}} \quad \text{(II.5)}$$

Avec F la portion de surface couverte par l'écume, $T_{b_{atm_dn}}$, $T_{b_{gal}}$ $T_{b_{sunglint}}$ les températures de brillance liées aux émissions de l'atmosphère descendantes, de la galaxie et du soleil qui sont diffusées par la surface de l'océan et $T_{b_{atm_up}}$ la température de brillance liée aux émissions atmosphériques ascendantes.

D'autres pollutions moins systématiques peuvent rendre l'estimation de la SSS par la Tb complexe. Bien que la fréquence utilisée soit protégée des émissions humaines, de nombreux signaux provenant généralement de bases militaires sont tout de même observés (Daganzo-Eusebio et al. 2013). Ces signaux engendrent des interférences (RFI) qui sont la source de fortes incertitudes localement. De plus très près des côtes ou de la glace, le capteur reçoit un peu des émissions du continent ou de la glace, qui sont très différentes de celles de l'océan. Cela engendre un biais côtier qu'il est possible de corriger en grande partie de façon empirique (Boutin et al. 2018), comme on le verra en section II.1.c. En revanche, la contamination par la glace, dont les frontières varient, reste très difficile à corriger actuellement. Les différentes composantes du signal reçu sont indiquées sur la Figure II.2.

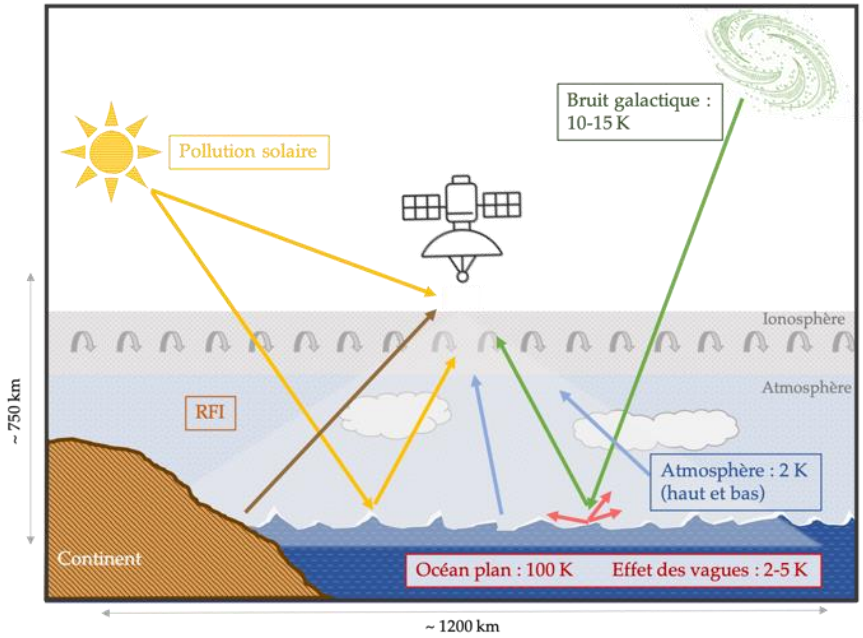


Figure II.2 : Les différentes pollutions du signal mesuré par les radiomètres en bande L (adapté de Reul et al. (2020)).

Il existe plusieurs modèles de constante diélectrique, qui permettent de relier la permittivité ε aux paramètres de l'eau de mer (température et salinité) à une fréquence donnée. Ces modèles reposent sur une approche semi-empirique, qui relie la permittivité de l'eau à la fréquence par

le biais d'une fonction paramétrique proposée par Debye (1929). Les paramètres de cette fonction sont déterminés empiriquement par des mesures en laboratoire ou avec des mesures satellitaires (Klein and Swift 1977, Meissner and Wentz 2012). Une modélisation alternative a été développée par Somaraju and Trumpf (2006), basée sur la modélisation des interactions ioniques dans l'eau de mer. Cette méthode fait intervenir moins de paramètres libres que celles considérées précédemment, et une étude récente à laquelle j'ai participé a montré qu'elle donne de meilleurs résultats pour la restitution de Tb à faibles températures (Boutin et al. 2020).

Les paramétrisations de la constante diélectrique (Boutin et al. 2021) et de l'émissivité de la surface de la mer due à la rugosité et à l'écume font encore l'objet de recherches actives (English et al. 2020).

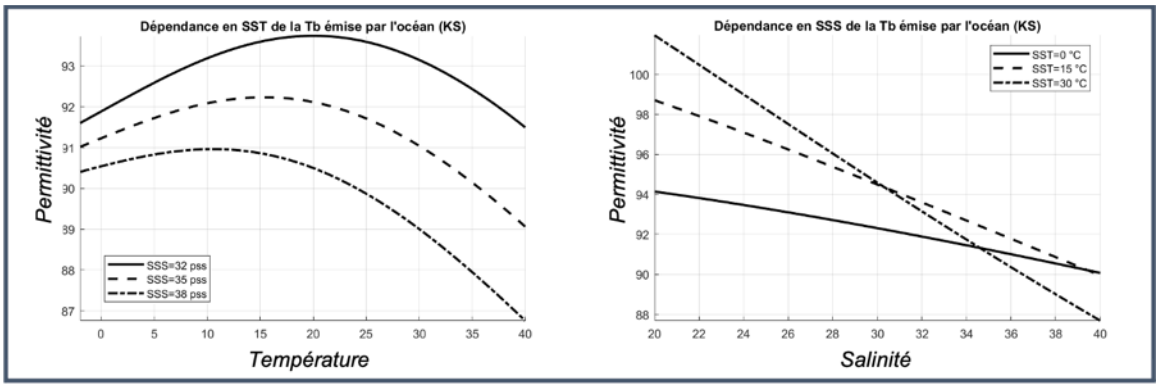


Figure II.3 : dépendance de la permittivité de l'océan à la SST à certaines valeurs fixes de SSS (gauche) et à la SSS à certaines valeurs fixes de SST (droite), d'après le modèle proposé par Klein and Swift (1977).

Chacune des variables de la fonction de transfert radiatif décrite dans l'équation peut donc être modélisée en fonction des caractéristiques de l'océan, de l'atmosphère et de la galaxie à l'aide des différents modèles décrits ci-dessus. Dans le processus de détection de la SSS par satellite le but est de retrouver les caractéristiques océaniques à partir d'une mesure de température de brillance, on procède donc à une inversion de l'équation (*II.5*).

Dans le cas de SMOS, à chaque prise de vue du satellite, le capteur mesure non pas une Tb mais plusieurs Tb sur les pixels du champ de vue du satellite, avec des angles de vue différents. Au fur et à mesure que le satellite se déplace, il mesure la Tb sur chacun des pixels plusieurs fois à plusieurs angles d'incidence, le long de ce que l'on appelle la "dwell line", parallèle à la trajectoire au sol du satellite. Comme les émissivités dépendent à la fois des caractéristiques géophysiques de la surface et de l'angle d'incidence, le principe de restitution de la SSS repose sur la recherche des paramètres qui donnent la meilleure adéquation entre les simulations théoriques, connaissant *a priori* certains paramètres de l'océan tels que la SST et la vitesse du

vent, et les températures de brillance multi-angulaires mesurées par satellite. Une approche bayésienne basée sur le maximum de vraisemblance est utilisée pour cela (Waldteufel et al. 2004, Zine et al. 2008). On cherche à réduire la fonction coût suivante :

$$\chi^2 = \sum_{n=1}^{N} \frac{[Tb_n^{meas} - Tb_n^{mod}(\theta_n, P_i)]^2}{\sigma_{Tb_n}^2} + \sum_{i=1}^{M} \frac{[P_i - P_{i0}]^2}{\sigma_{P_{i0}}^2} \qquad \text{(II.6)}$$

Avec Tb_n^{mod} les Tb dérivées du modèle direct, et Tb_n^{meas} les Tb mesurées par le satellite, N le nombre de mesures et M le nombres de paramètres géophysiques. P_{i0} est la valeur à priori du paramètre P_i ayant une variance à priori $\sigma_{P_{i0}}^2$

Minimiser cette fonction coût permet donc de trouver la SSS la plus vraisemblable par rapport aux différentes mesures de Tb d'un même pixel, en se rapprochant au mieux des SST et vitesse du vent connues *a priori* pour chacune des mesures. Cette approche multi-angulaire permet d'améliorer considérablement le rapport signal/bruit de la mesure SMOS (Boutin et al. 2012, Reul et al. 2012, Reul et al. 2014)

Dans le cas des SSS Aquarius et SMAP utilisées dans cette thèse, l'inversion de la SSS se fait après correction des perturbations géophysiques (Meissner et al. 2019).

b. Missions satellitaires pour la mesure de la SSS

- Soil Moisture and Ocean Salinity (SMOS)

La mission SMOS a été lancée le 2 novembre 2009 et est toujours en activité actuellement (Kerr et al. 2001). Elle fait partie du programme Earth Explorer de l'Agence spatiale européenne (ESA) et a été développée par l'ESA, le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) et le Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI). C'est le premier radiomètre en bande L dans l'espace à atteindre une couverture globale et continue, et le premier satellite à mesurer la SSS. Le concept de l'instrument était également très innovant car c'était le premier interféromètre 2D dans l'espace, permettant de fournir des mesures multi-angulaires de la surface.

SMOS est constitué de trois antennes individuelles, et mesure les corrélations entre les signaux détectés par ces trois antennes dans l'espace de Fourrier. Un processus de reconstruction d'images permet de reconstruire la Tb sur une grille régulière.

L'ESA utilise pour cela une grille ISEA de 15 km de résolution. La SSS comme on l'a vu précédemment, est déduite d'un ensemble de mesures de Tb prises sous des angles d'incidence variés, et la résolution effective de ces Tb dépend de l'emplacement de la mesure par rapport au champ de vision du satellite. Elle varie entre 30 km à 3 dB sous le satellite et 100 km en bord du champ de vue, pour une résolution moyenne de 43 km sur l'ensemble du champ de vision, libre de tout effet d'aliasing.

Cette résolution spatiale est inégalée mais la sensibilité radiométrique de SMOS est faible en comparaison aux autres radiomètres. Le processus d'acquisition multi-angulaire détaillé dans la section précédente permet d'améliorer considérablement le rapport signal sur bruit de la mesure.

SMOS a pour caractéristiques de parcourir le globe deux fois en moins de 3 jours ce qui permet de capturer les variables très fluctuantes, avec une orbite au crépuscule et à l'aube pour minimiser les gradients d'humidité et de température à l'interface entre l'atmosphère et la surface, et minimiser l'effet de rotation de Faraday. J'ai utilisé dans cette thèse les SSS SMOS produites par le CATDS, décrites plus dans la section II.1.c.

- Aquarius

Le 10 juin 2011, la mission Aquarius a été lancée à bord du vaisseau spatial SAC-D de l'Agence spatiale argentine CONAE. Les principaux capteurs de la mission comprenaient un radiomètre en bande L et un diffusomètre développé par la NASA. La mission avait deux objectifs scientifiques principaux : mesurer la SSS sur les océans exempts de glace avec une résolution spatiale de 150 km pour une revisite de 7 jours, et atteindre une erreur de mesure inférieure à 0,2 sur une échelle de temps de 30 jours. Le capteur Aquarius était composé de trois faisceaux, chacun avec une largeur et un angle d'incidence variables pour couvrir un faisceau au sol de 390 km. Les trois empreintes au sol mesuraient respectivement 74 km x 94 km, 84 km x 120 km et 96 km x 156 km. Les capteurs Aquarius évitaient systématiquement la pollution par le soleil (Lagerloef et al. 2008). Aquarius a un cycle d'exactement 7 jours et offre une couverture presque mondiale tous les 7 jours. Malheureusement, la mission Aquarius a été interrompue le 7 juin 2015 en raison d'un dysfonctionnement électronique sur la plateforme SAC-D.

Grâce à sa très bonne résolution radiométrique et à son système de filtrage des RFI embarqué, Aquarius a fourni des SSS de niveau 2 moins bruitées que celles de SMOS. Cela en a fait une référence de longue date pour la restitution des SSS à partir de mesures radiométriques en bande L. Cependant, des algorithmes récents ont permis une précision des SSS mensuelles de SMOS très similaire à celle des SSS mensuelles d'Aquarius de niveau 3, à condition que les RFI soient bien filtrées. SMOS est capable de détecter les gradients de SSS et les caractéristiques tourbillonnaires plus efficacement grâce à sa résolution spatiale supérieure, comme je le montre dans la partie III de ce manuscrit (Thouvenin-Masson et al. 2022) et comme l'ont montré Hasson et al. (2019). La combinaison de SSS SMOS et Aquarius peut améliorer la qualité des champs satellitaires mensuels de SSS, comme le démontrent Boutin et al. (2021).

- The Soil Moisture Active Passive mission (SMAP)

Le 31 janvier 2015, la mission SMAP a été lancée en collaboration entre le Centre de vol spatial Goddard de la NASA et le Jet Propulsion Laboratory. Cette mission avait pour but de créer une carte mondiale de l'humidité du sol tous les deux à trois jours. À l'origine, SMAP était constitué d'un radar et d'un radiomètre en bande L intégrés en un seul système d'observation pour des mesures actives et passives simultanées. En avril 2015, les instruments radar et radiomètre ont tous deux été mis en service. Cependant, le 7 juillet 2015, l'émetteur radar a cessé de fonctionner en raison d'une défaillance matérielle, laissant le radiomètre comme seul instrument opérationnel pour collecter des données scientifiques (Piepmeier et al. 2017). Malgré cette perte, les avancées matérielles ont permis des capacités d'acquisition plus sophistiquées que les précédentes missions. SMAP est en particulier doté d'une antenne à mailles rotatives de 6 mètres, une solution légère et résistante effectuant un balayage à 360°, et offrant une large couverture d'environ 1000 km à une résolution effective d'environ 43 km (Piepmeier et al. 2017). Les récepteurs SMAP enregistrent des données de sous-bande temps-fréquence, permettant d'identifier et de corriger la contamination par des sources de RFI rares et/ou dispersées (Piepmeier et al. 2014, Mohammed et al. 2016). Cette approche permet d'améliorer considérablement la précision radiométrique et la disponibilité des données en présence de RFI corrigeable. En l'absence de RFI, la précision des données SMAP de niveau 2 est équivalente à celle des SSS SMOS.

c. Champs de SSS dérivés au CATDS

Au cours de cette thèse, j'ai utilisé des champs de SSS de niveau 3 issus de la mission SMOS générés par le CATDS (Centre Aval de Traitement des données SMOS, (Boutin et al. 2018)). Les données sont corrigées avant interpolation temporelle (pondération par une fonction gaussienne), de deux biais systématiques :

- Biais latitudinal : on observe un biais sur les mesures de SSS éloignées des côtes, qui dépend de la latitude et varie saisonnièrement. Ces erreurs systématiques peuvent provenir de résidus de contamination par le soleil ou par la galaxie. On fait l'hypothèse que ce biais ne dépend que de la latitude φ, de l'orientation de l'orbite x_{orb}, de la distance par rapport au centre de la fauchée x_{swath} et du mois de l'année m. Pour corriger la SSS de ce biais, on recherche pour chaque orientation d'orbite x_{orb} et chaque mois des profils de référence, choisis parmi les différentes distances au centre de la fauchée pour avoir une différence à ISAS faible et stable sur plusieurs années. On ôte ensuite un biais latitudinal saisonnier estimé pour chaque mois et chaque x_{swath}, correspondant à la différence entre les profils de référence et les profils déterminés à partir des SSS SMOS.
- Biais côtier : La mesure satellitaire de SSS peut être contaminée par les surfaces continentales jusqu'à 1000 km des côtes. Le biais côtier résultant de cette contamination est considéré comme constant dans le temps et dépendant uniquement de la position géographique, de x_{orb} et de x_{swath}. Le temps de revisite de SMOS est approximativement de 18 jours et chaque position définie par les coordonnées latitude et longitude (φ, λ) est vu pendant cette période sur plusieurs orbites x_{orb} et à plusieurs distances du centre de la fauchée x_{swath}. Pour corriger ce biais, on considère que la variabilité à long terme de la SSS observée par SMOS en chaque position (φ, λ) doit être similaire quelles que soient x_{orb} et x_{swath}. Les biais relatifs liés à la contamination par la terre, b_{land}, par rapport à une SSS de référence, sont dérivés des SSS SMOS par une approche de minimisation des moindres carrés.

La méthode de correction des biais systématiques des champs de niveau 3 du CATDS se résume ainsi par cette équation :

$$\begin{aligned} SSS(t, \varphi, \lambda, x_{orb}, x_{swath}) \\ &= SSS_{ref}(t, \varphi, \lambda) - b_{land}(\varphi, \lambda, x_{orb}, x_{swath}) \\ &- b_{lat}(\varphi, x_{orb}, x_{swath}, m) \end{aligned} \tag{II.7}$$

Avec SSS la mesure corrigée et SSS_{ref} la SSS avant correction.

Une correction des biais systématiques similaire est employée lors de la génération des champs de niveaux 4 CCI décrits ci-dessous.

d. Champs de SSS dérivés par le projet CCI

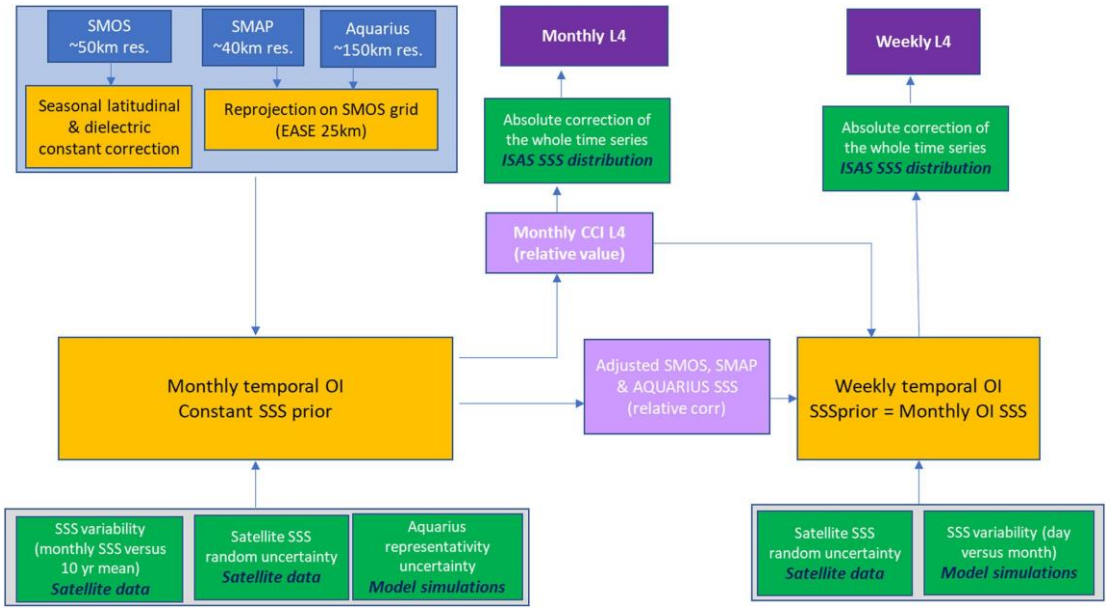


Figure II.4 : Schéma récapitulatif de l'algorithme permettant de générer les champs CCI hebdomadaires et mensuels à partir des mesures individuelles SMOS, SMAP et Aquarius (Boutin et al. 2021).

Dans cette thèse, j'ai utilisé en règle générale les champs de salinité de niveau 4 développés dans le cadre du projet Climate Change Initiative (CCI+SSS) de l'ESA. Ces champs sont le résultat d'une interpolation optimale des SSS inversées à partir des mesures des missions satellitaires SMOS, SMAP et Aquarius. Je présente ici une brève description de l'algorithme d'interpolation et d'estimation des incertitudes liées aux mesures permettant de générer les champs CCI version 3, qui est exposée en détail dans Boutin et al. (2021), publication à laquelle j'ai participé.

Un préalable à l'interpolation optimale est de corriger les erreurs systématiques. L'algorithme de correction est très similaire à celui implémenté au CATDS. Il a été appliqué aux mesures SMOS dans la version 3 des champs CCI (aux mesures SMOS, Aquarius et SMAP dans la

version 4 des champs CCI), des biais latitudinaux saisonniers ayant également été observés sur les SSS SMAP et Aquarius.

Une interpolation optimale est une méthode permettant de trouver le meilleur estimateur linéaire et sans biais d'un champ à partir de plusieurs mesures prises de ce champ. Elle permet de prendre en compte la diversité des mesures disponibles en termes de précision et de résolution, et est donc adaptée pour combiner des données de caractéristiques différentes telles que les mesures satellitaires de SSS issues des trois missions décrites ci-dessus.

Le principe de cette méthode se base sur le théorème de Gauss-Markov, qui indique que le meilleur estimateur linéaire non biaisé d'une combinaison linéaire des coefficients est son estimateur par les moindres carrés, dans le cas où les erreurs sont non corrélées, de variance égale et d'espérance nulle. Dans ce cas, le champ interpolé est la somme d'une première estimation de ce champ (ou champ de référence), et d'une anomalie obtenue comme une combinaison linéaire d'observations définie par une matrice de gain $\mathbf{K}^{\mathrm{OI}}$.

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\mathrm{ref}} + \mathbf{K}^{\mathrm{OI}}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_{\mathrm{ref}}) \qquad \text{(II.8)}$$

Avec $\mathbf{x}$ le champ interpolé, $\mathbf{x}_{\mathrm{ref}}$ le champ de référence, $\mathbf{y}$ les observations et $\mathbf{y}_{\mathrm{ref}}$ la valeur du champ de référence aux points d'observation.

Cette matrice est construite à partir de matrices de covariance :

$$\mathbf{K}^{\mathrm{OI}} = \mathbf{C}_{\mathrm{ao}}(\mathbf{C}_{\mathrm{oo}} + \mathbf{R})^{-1}, \qquad \text{(II.9)}$$

$\mathbf{C}_{\mathrm{ao}}$ est la matrice de covariance entre le champ analysé aux points de grille et les différentes observations ; $\mathbf{C}_{\mathrm{oo}}$ est la matrice de covariance du champ de référence dans l'espace d'observation.

La matrice de gain peut s'exprimer selon le formalisme utilisé dans Ide et al. (1997)

$$\mathbf{K}^{\mathrm{OI}} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1} \qquad \text{(II.10)}$$

Avec **B** la matrice de covariance de l'erreur de la première estimation. **H** est définie telle que $\mathbf{BH}^{\mathrm{T}} = \mathbf{C}_{\mathrm{ao}}$

La matrice de covariance de l'erreur *a priori*, $\boldsymbol{B}$, contient les fluctuations aléatoires autorisées autour du champ *a priori* de SSS, σ_{sss}.

Dans le cas de l'interpolation des champs mensuels, $\mathbf{x}_{\mathrm{ref}}$ est constant dans le temps et σ_{sss} est dérivé à partir d'une climatologie mensuelle de la variabilité de SSS. Dans le cas de l'interpolation optimale hebdomadaire, on utilise la SSS mensuelle comme champ de première estimation, et σ_{sss} est dérivé des incertitudes de la SSS mensuelle combinées avec la variabilité attendue entre les champs mensuels et hebdomadaires. Les champs de variabilité dépendent de la saison et varient géographiquement, et sont obtenues à partir de modèles océaniques.

La matrice **R** comprend l'incertitude aléatoire de l'observation satellitaire SSS, Co, et une incertitude liée aux erreurs de représentativité, Cr, qui est ajoutée pour tenir compte de la différence de résolution des champs. Cette matrice est supposée diagonale, ce qui signifie que les erreurs ne sont pas corrélées.

$$\mathbf{R} = \mathrm{Co} + \mathrm{Cr} \qquad \text{(II.11)}$$

Cette méthode d'interpolation permet théoriquement d'accéder à la meilleure estimation du champ de SSS à partir des différentes mesures satellitaires, mais nécessite une bonne connaissance *a priori* des variabilités des champs qu'on attend, et des différences de variabilité entre les mesures satellitaires utilisées, et entre les données mensuelles et hebdomadaires. J'ai contribué à cette interpolation pour la troisième version des champs CCI+SSS, en fournissant les différentes variabilités de SSS attendues entre les différentes résolutions satellitaires, à partir d'un modèle haute résolution GLORYS à 1/12° comme décrit dans la section II.8). Cela permet de fournir les champs Cr et σ_{sss} décris ci-dessus.

La SSS CCI moyenne ainsi que le champ d'erreur moyen associé sont représentés Figure II.5.

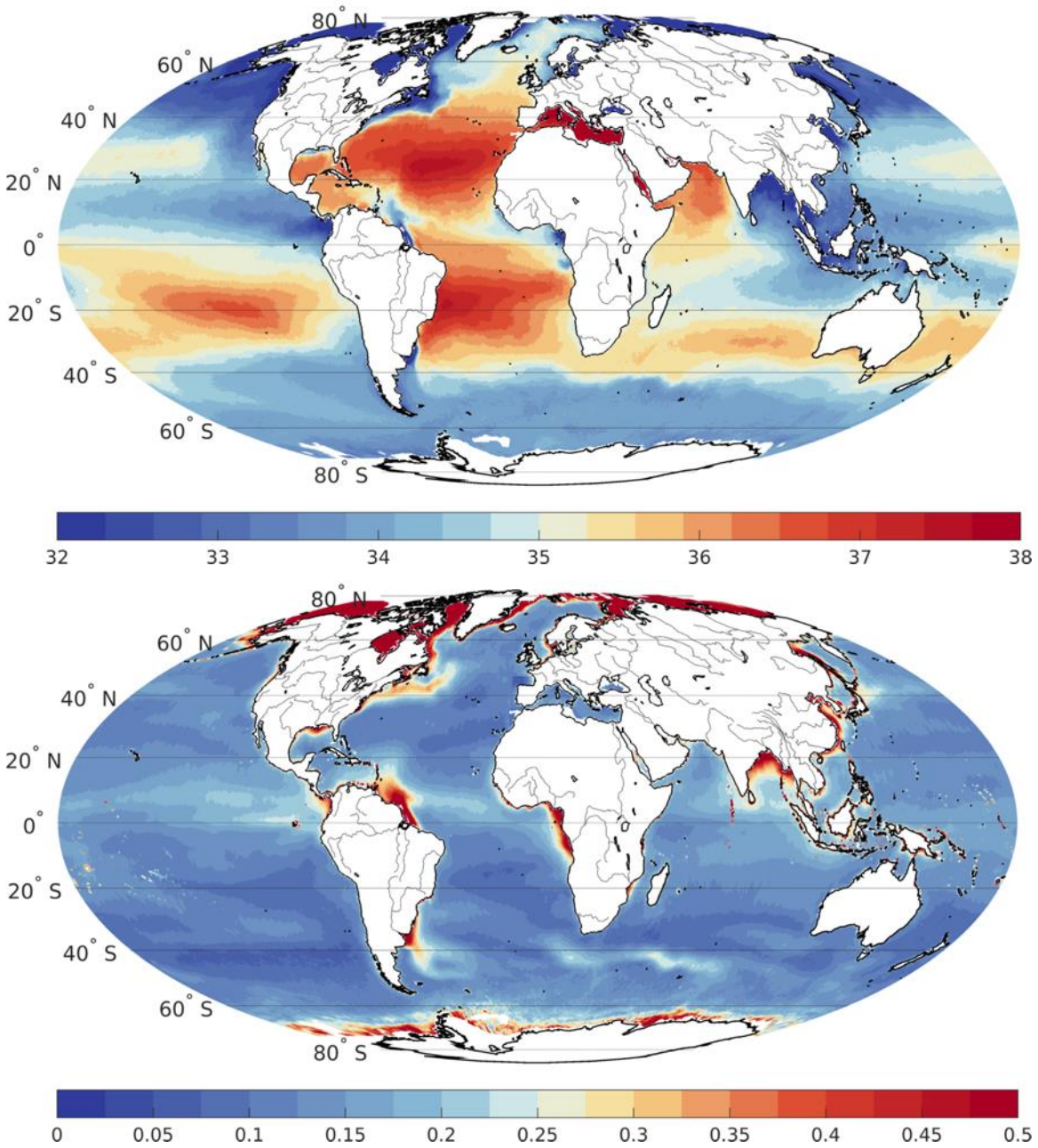


Figure II.5 : Champ de SSS CCI moyenné sur l'année 2017 (haut) et champ d'erreurs associées (bas), en pss.

2) La mesure de la salinité *in situ*

a. Argo

Argo est un programme d'acquisition de données océanographiques créé en 2000. Il est constitué d'un réseau de profileurs permettant de mesurer la salinité, la pression et la température à diverses profondeurs. Une fois déployé, un profileur Argo effectue des cycles de descente et remontée en ajustant sa flottabilité par un système de ballasts. Pendant chaque cycle, l'instrument plonge à 1000 m et y reste 10 jours dérivant avec les courants, puis il continue sa descente jusqu'à 2000 m de profondeur, et remonte ensuite à la surface (Roemmich et al. 1999). Pendant toute la durée du cycle le capteur prend des mesures de salinité, température et pression qu'il transmet par une connexion satellite lorsqu'il atteint la surface.

Le réseau est composé également de profileurs Bio-Argo qui peuvent être équipés de capteurs supplémentaires pour mesurer la teneur en oxygène, le pH de l'océan et d'autres paramètres biogéochimiques tels que les nitrates et la chlorophylle, et de profileurs Deep-Argo qui échantillonnent l'océan jusqu'à 6000 m de profondeur.

Le capteur CTD des flotteurs Argo mesure la température avec une précision de 0,001 °C, la pression avec une précision de 0,1 dbar, et calcule la salinité en utilisant la conductivité, la température et la pression avec une précision de 0,001 pss. Après calibration, la précision est estimée à 0,01 °C et 0,02 pss, une précision meilleure que celle des mesures satellitaires.

La densité des mesures Argo depuis le lancement de SMOS est illustrée sur la Figure II.6 issue d'un rapport du « Pilot-Mission Exploitation Plateform » (Pi-Mep, (Guimbard et al. 2021)). Actuellement, le programme Argo est composé de 3800 profileurs qui collectent environ 400 profils chaque jour, ce qui équivaut à 12 000 profils chaque mois. plus de 2 millions de profils hydrométriques ont été collectés depuis le lancement du projet, et sont mis à disposition gratuitement (http://www.argo.ucsd.edu).

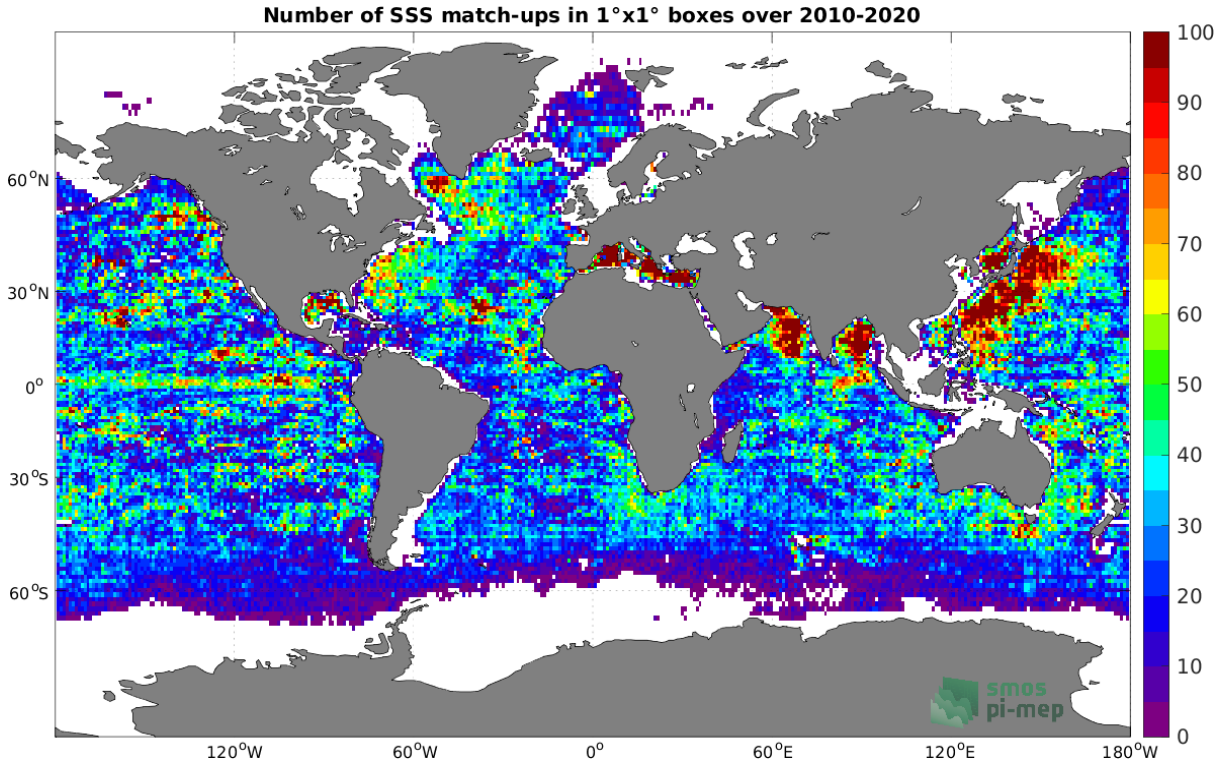


Figure II.6 : Nombre de flotteurs argo disponibles entre 2010 et 2020, dans des boîtes de 1°x1° (issu de la plateforme Pi-Mep).

Les mesures Argo sont des données ponctuelles, et leur répartition n'est pas uniforme sur l'océan. En moyenne, la distance entre deux mesures est de 3°. Le champ In situ Analysis System (ISAS) Gaillard et al. (2015) propose une interpolation de ces données afin d'estimer la salinité sur toute la surface des océans et en profondeur, par une méthode d'interpolation optimale similaire à celle décrite en section II.1.d.

Les données Argo couvrent la quasi-totalité des océans, et sont pour cela communément utilisées pour la validation de données satellitaires. Le PI-Mep se base entre autres sur ce jeu de données pour évaluer la qualité des différents champs de SSS issues de mesures satellites. Cependant, cette approche a des limitations liées à la résolution des données. La première concerne la profondeur des mesures. Les profileurs Argo ne prennent en général des mesures qu'à des profondeurs supérieures à ~2 m et sont donc incapables de détecter les gradients de salinité dans les premiers mètres sous la surface de l'océan, qui peuvent être importants dans les panaches de rivières ou les lentilles d'eau douce provoqués par des épisodes de pluie (Boutin et al. 2016).

La deuxième limitation concerne la distribution géographique des mesures. Les profileurs dérivent en suivant les courants et sont donc dépendants des convergences et divergences océaniques. Certaines régions (comme par exemple le plateau continental longeant la côte

Sénégalaise) ne sont jamais traversées par les flotteurs. Une étude en cours (Reverdin, G., Olivier, L., Cabanes, C., Boutin, J., Thouvenin-Masson, C., Vergely J.-L., Kolodziejczyk, N., Thierry V., Khvorostyanov, D., and Jouanno, J. "Missing Argo float profiles in highly stratified waters of the Amazon River plume", submitted to J. Atmos. Oceanic Technol.), à laquelle j'ai participé, montre également que les flotteurs peuvent rester bloqués en profondeur et ne pas transmettre de données dans les régions fortement stratifiées comme le panache de l'Amazone.

Enfin, les mesures prises par ces flotteurs sont ponctuelles, et n'ont donc pas le même échantillonnage que les données satellitaires. Cela entraîne une incertitude de représentativité (définie en détail en section II.6).) lors des comparaisons qu'il est important de prendre en compte dans les budgets d'erreur (Merchant et al. 2017). Dans la première partie de cette thèse, je m'intéresse à cette incertitude, que j'estime à chaque mesure Argo colocalisée aux champs satellites à l'aide d'un modèle océanique de haute résolution (section III).

J'utilise également les flotteurs Argo pour valider les simulations utilisées dans la région de l'Afrique de l'Ouest (section V). J'ai utilisé dans tous les cas les mesures de flotteurs flaggées « bonnes » et uniquement à des profondeurs inférieures à 10 m.

b. ThermoSalinoGraphes

Les thermosalinographes (TSG) sont des instruments très communément mis en place sur les navires océanographiques. Ils sont directement reliés à la prise d'eau du navire qui les transporte, et mesurent par le biais d'électrodes et de thermistances la conductivité et la température de l'eau. La salinité est ensuite calculée à partir de ces deux variables.

Les capteurs TSG généralement utilisés sont des capteurs Seabird SBE21, et sont systématiquement installés sur les navires océanographiques, ainsi que sur un réseau de bateaux marchands grâce au Service National d'Observation SSS (SNO SSS) (Alory et al. 2015).

L'avantage principal de ces mesures réside dans leur très bonne résolution temporelle et spatiale le long de la trajectoire du bateau : les mesures sont enregistrées très fréquemment, ce qui permet d'atteindre une résolution spatiale inférieure au kilomètre. Cependant, elles sont limitées au trajet du bateau, la distribution des mesures sur l'océan est donc très dépendante du trafic maritime des bateaux équipés de TSG, comme on peut le voir Figure II.7 : les données

du SNO SSS sont très fréquentes dans l'Atlantique nord, mais presque inexistantes dans le Pacifique Nord ou dans l'océan Indien. Autre limitation, les prises d'eau des navires varient et sont généralement comprises entre 5 m et 10 m, ce qui, comme pour les flotteurs argo, rend difficile l'observation des dessalures de surface liées aux panaches de rivières ou aux cellules de pluies qui n'atteignent pas systématiquement ces profondeurs.

Pour cette thèse j'ai eu recours à ce jeu de données à deux reprises. Dans la première partie, il a été utilisé afin de valider les variabilités spatiales de la simulation GLORYS (section III). Il a ensuite servi à valider les simulations issues du modèle CROCO utilisé dans la région de l'Afrique de l'Ouest (section V). J'ai utilisé pour cela les données en temps différé, flaggées « good » ou « probably good ».

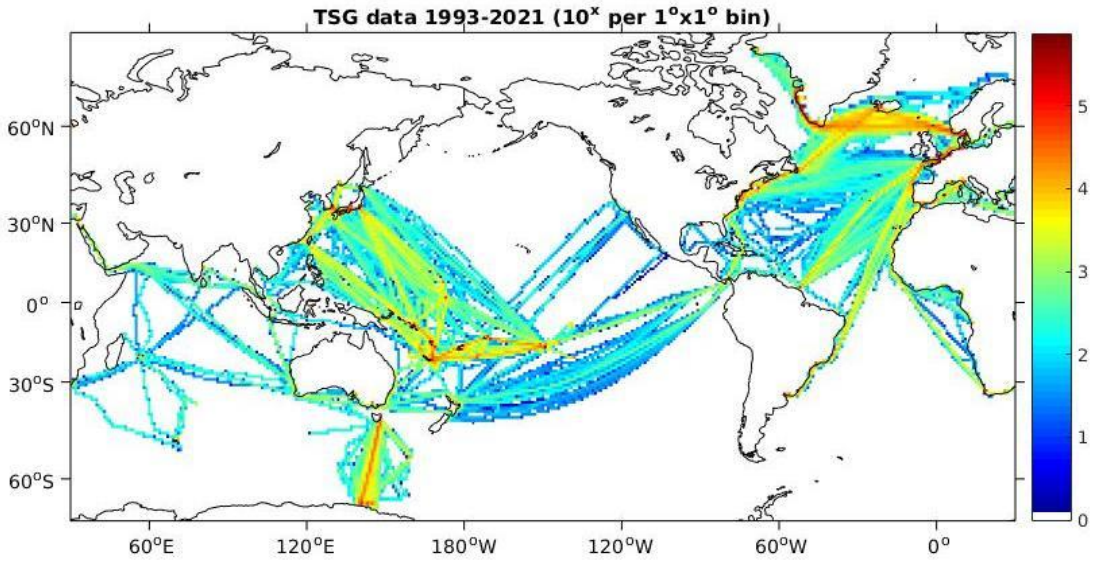


Figure II.7 : Données de TSG entre 1993 et 2021, mises à disposition par le SNO-SSS

c. Mouillages

Le troisième type de données *in situ* utilisé est la mesure prise au niveau de mouillages. Sur ces systèmes, des capteurs sont fixés sur une bouée ancrée, permettant de prendre des mesures à différentes profondeurs choisies au préalable. Des capteurs de salinité, de température ou de courants, ainsi que dédiés à la biologie ou à la biogéochimie sont en général installés sur ces bouées, et associés en surface à des capteurs atmosphériques. Ces capteurs sont reliés à un émetteur en surface qui transmet en temps réel les données par le biais d'un réseau satellitaire.

Plusieurs grands réseaux de mouillages ont été installé : dans l'océan Pacifique, le réseau Tropical Atmosphere Ocean (TAO/TRITON), a été installé pour mieux comprendre le

phénomène El-Niño. Dans l'océan Indien, le réseau African-Asian-Australian Monsoon Analysis and Prediction (RAMA) sert principalement à l'étude du rôle de l'océan sur la mousson indienne et africaine. Dans l'océan Atlantique, le réseau « Prediction and Research Moored Array in the Tropical Atlantic » (PIRATA) (Servain et al. 1998, Bourlès et al. 2008) a été développé pour étudier les interactions océan-atmosphère dans les régions tropicales. La Figure II.8 décrit ce réseau.

L'intérêt de ces données est de permettre une observation eulérienne des masses d'eau, la structure verticale de l'océan, et les phénomènes de grande échelle, à l'échelle d'un bassin océanique. La mesure synchronisée de variables atmosphériques leur donne également un grand intérêt pour les études de relations océan-atmosphère. Elles bénéficient d'un très bon échantillonnage temporel, pouvant être horaire, mais l'éloignement entre les mouillages est de l'ordre du millier de kilomètre.

J'ai utilisé le jeu de données PIRATA dans la première partie de ma thèse, pour valider la variabilité temporelle de la simulation GLORYS (section III). J'ai également participé à une campagne de relevage annuel des mouillages, que je vais décrire plus bas (section II.2.d.).

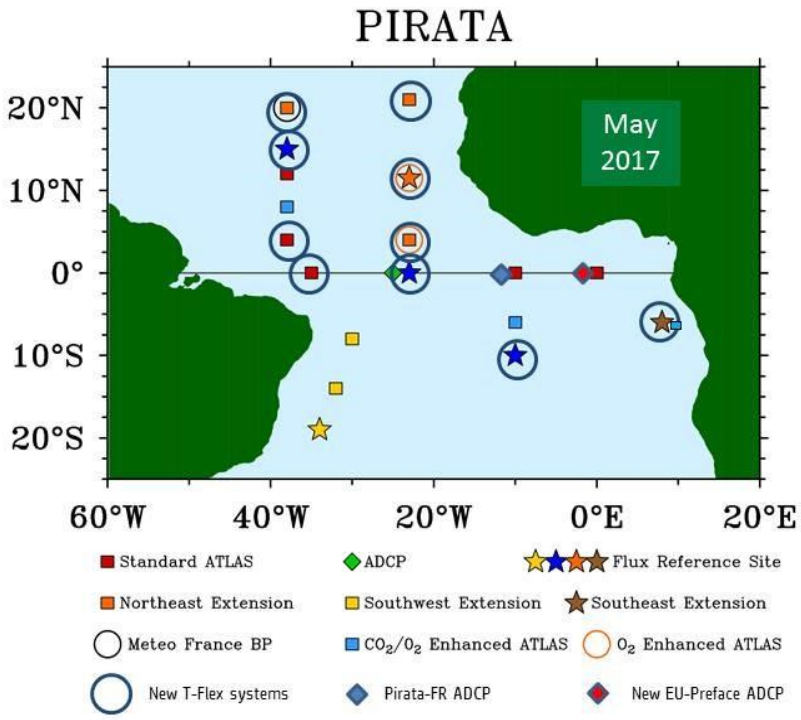


Figure II.8 : Carte représentant les différentes bouées du réseau PIRATA, dans l'Atlantique tropical (www.brest.ird.fr/pirata/pirata.php)

Un autre mouillage utilisé pour mon étude sur la salinité près de la côte de l'Afrique de l'Ouest est la bouée Melax (https://sites.google.com/site/jointinternationallabeclairs/Melax; Figure II.9). Cette bouée, déployée en 2015 et maintenue par le laboratoire mixte international ECLAIRS2, est équipée également de capteurs océanographiques et atmosphériques. Elle est dédiée au suivi et à l'analyse des changements à court et long terme du climat au niveau de l'upwelling sénégalais. Elle est située à 30 km au large de la ville de Mbour, sur le plateau continental sénégalais, à une profondeur de 30 mètres, aux coordonnées 14°20' Nord et 17°14' Ouest. Les données collectées sont, pour l'atmosphère, le vent de surface, le rayonnement solaire, l'humidité et la pluie, et pour l'océan, les températures, la salinité, et les courants (de la surface au fond) et l'oxygène et sont transmises par satellite.

La bouée a notamment permis de capter la salinité de surface en continu pendant une période de près de deux ans entre le début de l'année 2015 et l'été 2016.

Figure II.9 : Photographie de la bouée Melax.

d. La campagne PIRATA-FR32

Comme évoqué plus haut, j'ai participé pendant ma thèse à la campagne PIRATA-FR32.

Cette campagne est la 32ème de la série des campagnes annuelles organisées par la France depuis le début du programme en 1997 dans le cadre du programme PIRATA. Elle avait pour but principal de remplacer certaines des bouées météo-océaniques du réseau de bouées, décrit dans la section précédente. Elle a été menée à bord du navire océanographique Thalassa sur 40 jours de mer entre le 15 février et le 12 avril 2021, avec une escale sur l'île de Sainte-Hélène. Le trajet de la mission est décrit sur la Figure II.10. Je travaillais en quarts et j'ai pu participer à des mesures et à des déploiements de capteurs divers :

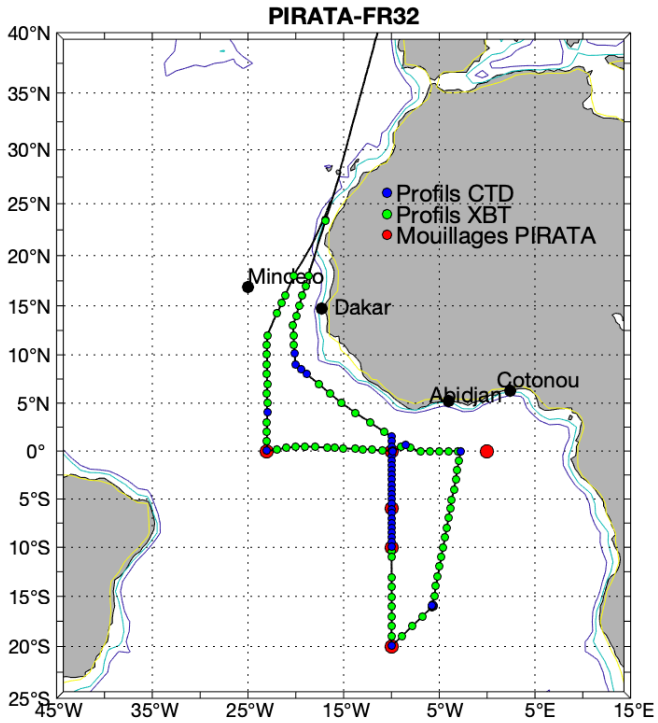


Figure II.10 : Plan de campagne PIRATA-FR32, issu du site www.brest.ird.fr/pirata/pirata_cruises.fr.

Remplacement et déploiement de bouées

Pendant cette campagne, quatre bouées ont été remplacées à 23°W-0°N, 0°E-0°N, 10°W-6°S, 10°W-0°E, et 2 autres redéployées à 10°W-10°S, et 10°W-20°S suite à leur décrochage et dérive en juin et juillet 2021 en raison d'un acte de vandalisme par des pêcheurs industriels. Ma contribution à ces travaux consistait principalement à installer les capteurs atmosphériques sur

les bouées à déployer, et à nettoyer les bouées récupérées en récupérant quelques échantillons d'anatifes pour des études biologiques.

-

Figure II.11 : une des bouées PIRATA déployées pendant la campagne.

- Profils CTD

Mon activité scientifique principale pendant cette campagne consistait à effectuer des profils CTD régulièrement le long du trajet du bateau sur les radiales à 10°W et 23°W. Nous avons effectué également en deux points fixes, des stations de 48h pendant lesquelles un profil CTD toutes les trois heures jusqu'à 200m a été réalisé, pour observer les variations diurnes de l'océan. Au total, 78 stations CTD ont été réalisées pendant la mission.

Figure II.12 : la rosette, constituée de la CTD et de bouteilles Niskin, déployée à proximité de la côte de l'île de Sainte-Hélène.

- Analyses chimiques

Les capteurs CTD étaient accompagnés d'une rosette composée de 24 bouteilles Niskin, dont la fermeture pouvait être commandée depuis le bord à des profondeurs choisies. À chaque profil nous avons donc prélevé des échantillons d'eau, que nous avons ensuite analysés pour déterminer leur salinité, leur concentration en dioxygène et oxygène 18 dissous, en Carbone 13 et Carbone Inorganique Dissous (DIC/C13), ainsi que leur alcalinité (DIC/TA). Nous avons également mesuré le pH, la quantité de matière organique dissoute et de pigments Chlorophylliens.

Ces analyses étaient également appliquées à des échantillons d'eau de surface pris pendant les déplacements du bateau.

- Profils courantométriques par profileurs acoustiques de vitesse par effet Doppler (LADCP)

Sur les rosettes utilisées pour les profils CTD était également installé un LADCP à 300kHZ, qui permet de mesurer les courants à toutes les profondeurs traversées par le capteur. Les données étaient ensuite récupérées à bord et j'ai participé à leur traitement. Les mesures prises le long de la section à 10°W permettent de mettre en évidence les courants équatoriaux (voir Figure II.13).

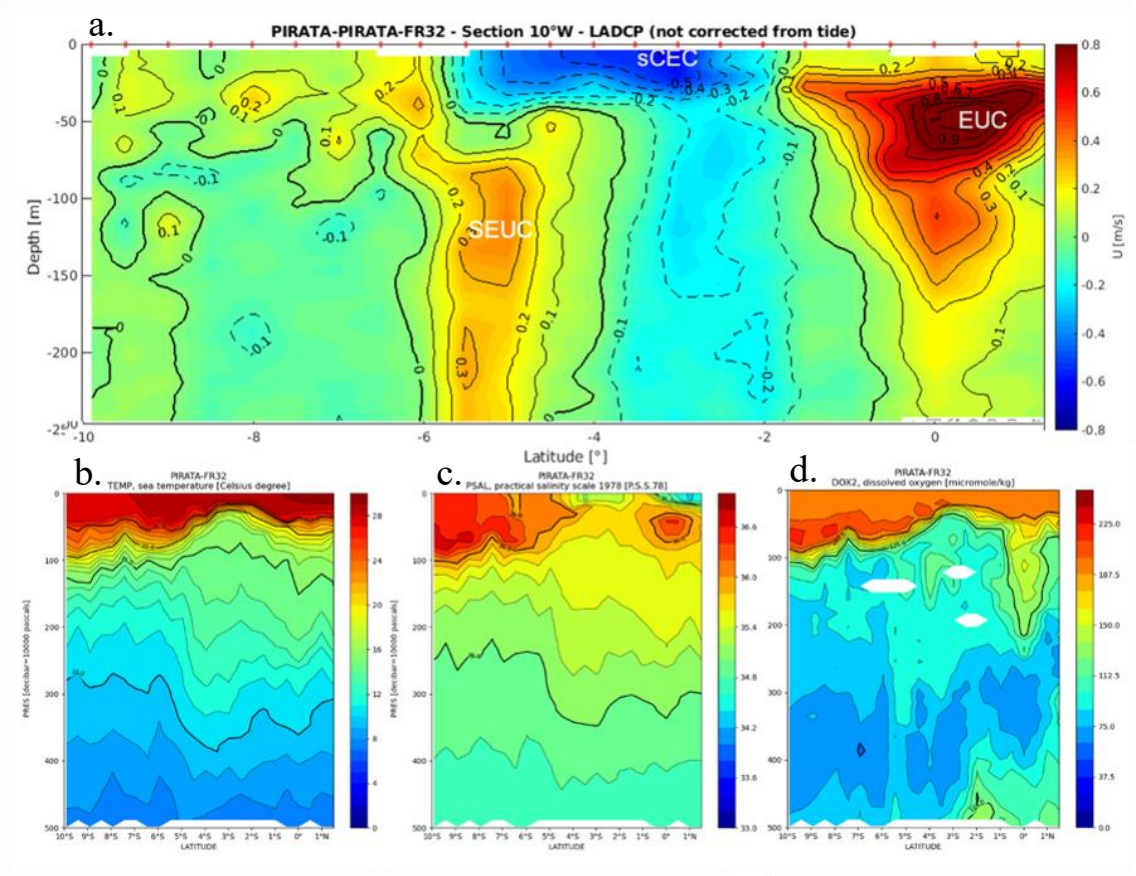


Figure II.13 : Résultats des mesures de (a) courant, (b) température, (c) salinité et (d) dioxygène dissout, par les profils CTD le long de la radiale 10°W. SEUC : South Equatorial UnderCurren ; sCEC : South Equatorial Current ; EUC : Equatorial Uncer Current. Figures issues du rapport de mission PIRATA-FR32 (https://www.brest.ird.fr/pirata/pirata_cruises_fr).

- Profils Expendable bathythermograph (XBT)

Les XBT sont des capteurs de température que l'on lance par-dessus bord, et qui sont reliés au bateau par le biais d'un fil de cuivre qui se déroule lors de la chute de l'instrument. 84 tirs XBT ont été lancés pendant la campagne, à des intervalles de latitude réguliers, permettant de mesurer des profils de température entre la surface et 800 m de profondeur. Ces tirs faisaient partie de mes tâches à bord.

- Mesures en continu par les instruments à bord du navire

Le navire océanographique Thalassa est équipé de capteurs qui mesurent continument des données liées à l'océan, notamment un ADCP de coque, des sondeurs acoustiques et un TSG. Pour cette campagne j'avais écrit un programme pour recevoir automatiquement par e-mail les données SMOS traitées en temps quasi réel (NRT) par le CATDS (voir section II.1.c sur la région traversée par le bateau, ce qui m'a permis de faire des comparaisons entre le TSG et les mesures satellitaires en temps quasi-réel. Les résultats de cette comparaison sont représentés sur la Figure II.14, et montrent une bonne cohérence globale des mesure satellites et *in situ*, malgré une surestimation de la mesure SMOS près de Gibraltar. Le point fixe réalisé les 24 et 25 mars 2022 montre bien la différence de résolution entre les deux mesures, et illustre l'importance de la variabilité de la SSS sous l'échelle satellitaire que j'étudie plus bas.

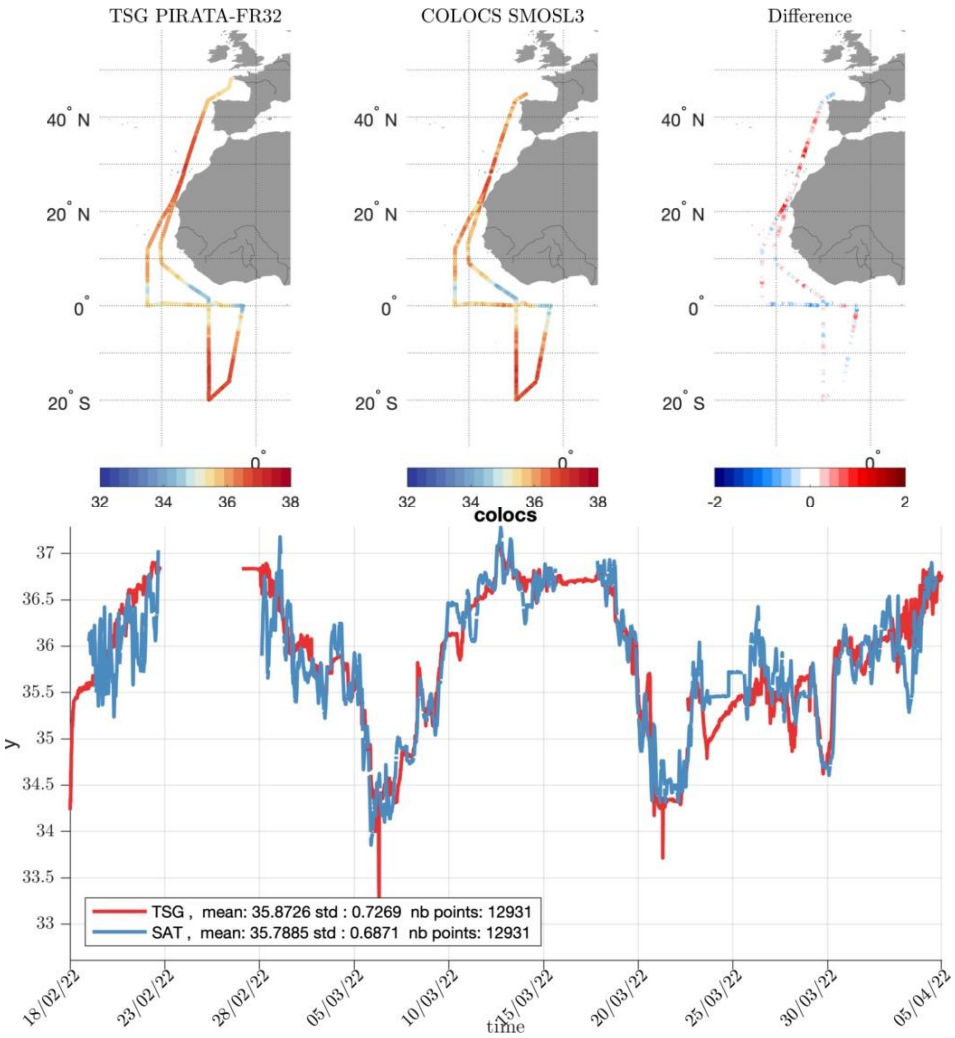


Figure II.14 : Comparaison des mesures du TSG du Thalassa pendant la mission PIRATA-FR32 aux mesures SMOS colocalisées, en pss. En haut, de gauche à droite : mesures TSG, mesures SMOS colocalisées, et différence entre les deux (SMOS – TSG). En bas : série temporelle des mesures du TSG (rouge) et des mesures SMOS colocalisées (bleu).

Enfin j'ai participé au déploiement et à la récupération de profileurs Argo et de bouées dérivantes. J'ai également prélevé des sargasses et des anatifes, ainsi que des échantillons de thons pour analyser leur teneur en mercure. La liste exhaustive des mesures prises pendant cette campagne peut être trouvée dans le rapport de campagne, sur le site https://www.brest.ird.fr/pirata/pirata_cruises.

Figure II.15 : Profileur Argo et bouée dérivante déployés pendant la campagne PIRATA-FR32.

3) Les modèles océaniques

Tant dans la partie sur la variabilité à fine échelle sur l'océan global que dans la partie sur la variabilité liée aux forçages dans la région du Sénégal, j'ai eu systématiquement recours à des simulations issues de modèles océaniques. Par rapport aux données *in situ* et satellitaires les modèles offrent une couverture globale des océans avec une résolution et un échantillonnage spatiotemporels inatteignables avec des mesures, y compris sur la dimension verticale. De plus, ils permettent des études de sensibilités aux différents forçages appliqués. Bien qu'il soit connu que les processus de mésoéchelle ne soient pas encore très bien représentés individuellement dans les modèles (Hewitt et al. 2020), ils permettent d'estimer statistiquement leur puissance, même si cette estimation varie en fonction des modèles (Uchida et al. 2022).

a. Réanalyse GLORYS

Pour étudier la variabilité de la SSS sous la résolution des champs satellitaires (section III), j'utilise les réanalyses quotidiennes de salinité GLORYS à 1/12°, produites par Mercator (Lellouche et al. 2018). Dans cette première approche, j'ai considéré qu'elles résolvaient la variabilité à l'intérieur d'un pixel satellitaire, et représentaient un bon compromis entre la résolution et le volume de données relativement restreint permettant d'étudier la totalité de l'océan. J'ai vérifié que la puissance spectrale dans les petites échelles fournis par GLORYS étaient cohérentes avec celles de mesures ponctuelles *in situ*.

La simulation GLORYS12V1 (appelée GLORYS dans la suite) est une réanalyse CMEMS de l'océan permettant de résoudre les échelles tourbillonnaires. Ces données sont disponibles de 1993 à aujourd'hui, mais je n'ai utilisé pour cette étude que la période couverte par les mesures satellites, de 2010 à 2020. Ces réanalyses sont basées sur le modèle océanique NEMO, forcé en surface par les données ERA5 et par les débits fluviaux climatologiques proposés par Dai et al. (2009). Les anomalies du niveau de la mer, la SST, la concentration de glace de mer, les profils verticaux de température et de salinité *in situ* sont assimilés à l'aide d'un filtre de Kalman avec un cycle d'assimilation de 7 jours (Lellouche et al. 2018). La SSS satellitaire n'est pas assimilée dans cette simulation.

Les données sont disponibles à une résolution temporelle quotidienne et sur une grille régulière de 1/12°, pour 50 niveaux de profondeur, en commençant par la surface de la mer avec des niveaux à 0,5 m, 1,5 m, 2,6 m, 3,8 m et 5 m. Dans l'étude des erreurs de représentativité j'utilise le niveau à 5 m de profondeur, pour comparaison à la mesure Argo la plus proche de la surface. J'utilise également cette réanalyse comme comparaison aux simulations CROCO ou aux mesures satellites, dans ce cas la couche la plus proche de la surface (à 0.5m de profondeur) est utilisée.

b. CROCO

Pour l'analyse des variations de salinité près de la côte Ouest Africaine (section V), j'utilise des simulations fournies par Vincent Échevin, à partir du modèle hydrodynamique Coastal and Regional Ocean COmmunity (CROCO, https://www.CROCO-ocean.org/ ; (Hilt et al. 2020)), particulièrement adapté aux études régionales. Ce modèle est une évolution du Regional Ocean Modeling System (ROMS ; (Shchepetkin and McWilliams 2005, Shchepetkin and McWilliams 2009).

CROCO présente plusieurs propriétés intéressantes pour l'étude régionale de l'océan. Les coordonnées verticales sur des niveaux sigma, qui suivent la bathymétrie et représentent une profondeur par rapport à la hauteur totale de la colonne d'eau, permettent d'améliorer les résolutions spatiales de la surface et du fond. On peut également mettre en place un raffinement adaptatif de la grille horizontale (AGRIF ; (Debreu et al. 2008)) qui permet la résolution des circulations à l'échelle régionale et à l'échelle locale sur des sous-domaines, en ajustant la résolution localement. La grille enfant (haute résolution) reçoit des informations sur les conditions aux limites de la grille parent et rétroagit sur celle-ci. Dans la simulation utilisée pendant cette thèse la grille parent a une résolution moyenne de 10 km, et une grille enfant est utilisée dans la région de la Casamance avec une résolution de 2 km. Le maillage vertical est constitué de 50 couches dont les profondeurs suivent la bathymétrie (coordonnées σ). Voir Ndoye et al. (2018) pour plus d'information sur cette simulation. CROCO traite séparément le mode lent barocline et le mode rapide barotrope (Shchepetkin and McWilliams 2005), ce qui permet d'améliorer la cohérence, la précision et la stabilité de la simulation. L'utilisation de schémas numériques d'ordre élevé favorise également la performance et la précision des calculs.

CROCO résout l'ensemble suivant d'équations et d'hypothèses qui sont les équations primitives. Ces équations décrivent (1,2) le bilan de quantité de mouvement, (3) l'évolution temporelle d'un traceur (par exemple, la température) et (4) l'équation d'état. L'hypothèse hydrostatique équilibre le gradient de pression vertical avec la force de flottabilité, et l'hypothèse de Boussinesq est utilisée, qui ignore les différences de densité sauf lorsqu'elles affectent la flottabilité, ce qui donne l'équation (5). Le fluide est incompressible de sorte que la divergence de vitesse est nulle, ce qui donne l'équation (6).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}u) - fv = -\frac{\partial \phi}{\partial x} + \mathcal{F}_u + \mathcal{D}_u \quad (1)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}v) + fu = -\frac{\partial \phi}{\partial y} + \mathcal{F}_v + \mathcal{D}_v \quad (2)$$
$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}C) = \mathcal{F}_C + \mathcal{D}_C \quad (3)$$
$$\rho = \rho(T, S, P) \quad (4) \qquad \text{(II.12)}$$
$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = -\frac{\rho g}{\rho_0} \quad (5)$$
$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (6)$$

Avec les termes diffusifs $\mathcal{D}_u, \mathcal{D}_v, \mathcal{D}_C$; les termes de forçage $\mathcal{F}_u, \mathcal{F}_v, \mathcal{F}_C$; le paramètre de Coriolis $f(x, y) = 2\Omega \sin \varphi$ où φ est la latitude ; l'accélération de gravité g; la pression dynamique $\phi(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z}, \mathrm{t})$; $(\mathrm{x}, \mathrm{y}, \mathrm{z})$ les composantes de la vitesse vectorielle (u, v, w) et C un traceur.

Dans l'étude présentée dans cette thèse, le modèle CROCO a été utilisé avec différents forçages, afin de tester l'effet d'une modification de précipitations et de décharges de fleuve sur la salinité de surface. Les forçages sont décrits dans le Tableau 3. Les différentes simulations ont été générées par Vincent Échevin à partir de 2000 et jusque 2020 pour les simulations utilisant GloFAS et jusque juillet 2019 pour celles utilisant ISBA, car les données ISBA n'étaient disponibles que jusqu'à cette date au moment de l'étude. J'ai pour ma part préparé les champs de forçages ISBA, IMERG et les champs climatologiques. Je me suis intéressé aux simulations après 2010 uniquement, pour profiter de la disponibilité des mesures satellitaires.

Tableau 3 : paramétrisation des forçages des différentes simulations.

Nom	*Précipitations*	*Débits de fleuves*
CROCO	Champs horaires ERA5	Champs quotidiens GloFAS
CROCOclm	Champs horaires ERA5	Climatologie GloFAS
CROCOisba	Champs horaires ERA5	Champs quotidiens ISBA
CROCOimerg	Champs horaires IMERG	Champs quotidiens ISBA
CROCOprclm	Climatologie IMERG	Champs quotidiens ISBA

Le modèle, à l'exception des précipitations, est forcé avec les champs atmosphériques ERA5 (vent à 10 m, température de l'air à 2 m, flux solaire, flux infrarouge et humidité relative). Les simulations ne comprennent pas de marées.

Les décharges de fleuves sont introduites dans le modèle en quelques points de grille seulement, j'ai donc réparti les débits de fleuves issus des modèles hydrologiques sur ces points en assignant chaque fleuve au point de grille le plus proche, et donc en cumulant parfois plusieurs rivières au même point de grille (Figure II.16). Pour éviter des instabilités numériques, certaines embouchures de fleuves sont réparties sur plusieurs points de grilles. Dans notre région c'est le cas des fleuves Sénégal (sur 2 points) et Gambie (sur 3 points). Les débits sont répartis sur toute la profondeur au niveau du point de grille, et sont considérés dans le modèle comme un flux d'advection provenant du continent. La salinité et la température des eaux arrivant par les fleuves ont été fixées à 15 pss et 20 °C.

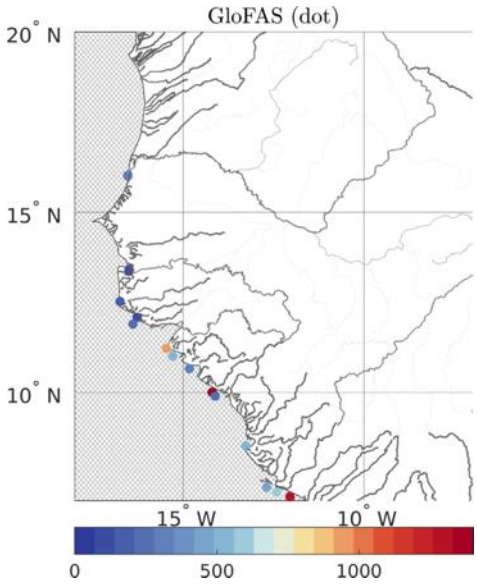


Figure II.16 : Points d'entrée de débits de fleuves dans la simulation CROCO. La couleur représente le débit moyen entre 2010 et 2019, en m^3/s.

Pour réaliser des essais sur la puissance du signal de salinité de surface à mésoéchelle et sub-mésoéchelle (section IV), j'ai cherché à utiliser des simulations issues de modèles océaniques mieux résolus que GLORYS. C'est le cas des simulations APLUME36 et GIGATL.

c. APLUME36

La simulation APLUME36 nous a été fournie par Julien Jouanno. Elle a été conçue pour étudier la dynamique du panache de l'Amazone et la variabilité de la SSS dans l'Atlantique tropical occidental. La grille du modèle couvre l'Atlantique tropical occidental à une résolution de 1/36° (5°S-20°N, 70°W-30°W). Les champs de salinité sont des moyennes journalières. Le maillage vertical comporte 75 niveaux verticaux, avec 12 niveaux dans les 20 premiers mètres et 24 niveaux dans les 100 premiers mètres.

Le modèle numérique est la composante océanique du programme Nucleus for European Modelling of the Ocean (Nemo4.2 ; (Madec et al. 2017)), forcé à ses frontières par les sorties quotidiennes de la réanalyse globale GLORYS de MERCATOR (Lellouche et al. 2021), et à la surface par la vitesse du vent, la température et l'humidité atmosphériques, le rayonnement de grande et de petite longueur d'onde et les précipitations ERA5. Cette simulation utilise le débit quotidien et interannuel de la "réanalyse japonaise sur 55 ans" (JRA-55 ; (Suzuki et al. 2018)), et inclut un forçage des marées. Une configuration régionale du modèle NEMO très similaire à celle utilisée ici a démontré sa capacité à représenter correctement la dynamique et les propriétés du panache de l'Amazone (Ruault et al. 2020).

Cependant, la région couverte par cette simulation se situe dans l'Atlantique tropicale où le rayon de déformation de Rossby est important, les structures mésoéchelles y sont de l'ordre de la centaine de kilomètres, l'énergie est donc plus faible aux échelles inférieures à la résolution satellite qui nous intéressent qu'à plus haute latitude. Nous avons donc étendu cette étude à des régions plus septentrionales, en utilisant une autre simulation de haute résolution, GIGATL.

d. GIGATL

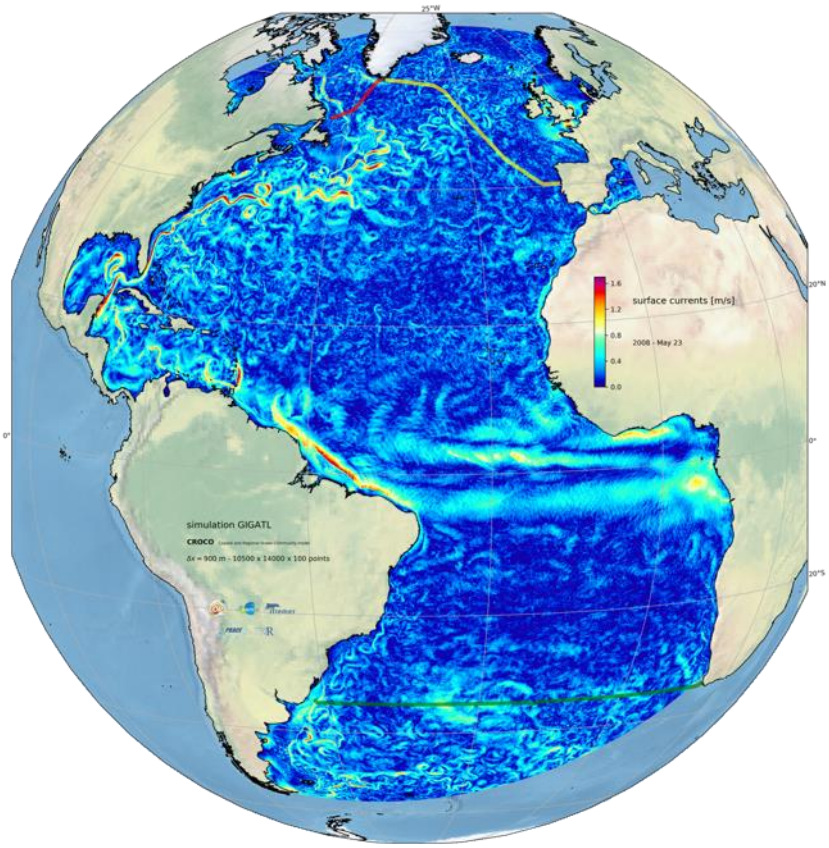


Figure II.17 : Courants de surface en m/s, le 23/05/2018, simulés par GIGATL (https://github.com/Mesharou/GIGATL).

La simulation GIGATL1 (https://github.com/Mesharou/GIGATL) nous a été fournie par Jonathan Gula. Elle se concentre sur l'Atlantique uniquement, et est réalisée à l'aide du modèle CROCO présenté ci-dessus. Cette simulation propose une résolution horizontale nominale de 1 km et 100 niveaux verticaux suivant la bathymétrie, d'épaisseur plus fine proche du fond et de la surface. La simulation s'étend de juillet 2007 à novembre 2009, et les sorties en trois dimensions sont enregistrées toutes les 3 heures.

Ses conditions initiales sont tirées de la simulation GIGATL à 3km de résolution et ses conditions limites pour les courants, la hauteur de la surface de la mer, la température et la salinité sont fournies par le jeu de données Simple Ocean Data Assimilation (SODA) (Carton and Giese 2008). Les données issues de la réanalyse Climate Forecasting System Reanalys (CFSR) (Saha et al. 2010) sont utilisées comme forçage atmosphérique horaire.

Dans l'étude régionale en Afrique de l'ouest (section V), je me suis focalisé sur les effets des différents forçages sur la salinité de surface, sur les flux et la structure verticale de l'océan, le long de la côte Ouest africaine. J'ai eu recours à des estimations de décharges fluviales et de précipitations, que je vais décrire maintenant.

4) Décharges de fleuves

La méthode la plus directe de mesure de débits de fleuves est la mesure *in situ*, faite à partir de capteurs installés à l'embouchure ou en amont des rivières. Cette méthode a cependant de fortes limitations : géographiquement, les données mesurées ne sont pas réparties de manière homogène, avec notamment plus de mesures dans les pays riches en raison du fort coût d'entretien de ce type de réseau, et les capteurs sont installés dans les principales rivières mais rarement dans des rivières de débit moyens, comme les rivières de la Casamance par exemple. Enfin ces données sont en général utilisées en premier lieu pour des études hydrologiques liées à l'accès à l'énergie ou à l'agriculture, et beaucoup de pays refusent l'accès libre à ce type de données. Depuis les années 1980, à cause de ces problèmes, la quantité de mesures *in situ* de débit de fleuves s'est considérablement amoindrie (Durand et al. 2019). Le jeu de données de référence concernant les débits de fleuves est une climatologie des plus importants fleuves mondiaux, proposée par Dai et al. (2009). La plupart des modèles océaniques se réfèrent à cette climatologie pour introduire les décharges fluviales.

Cependant, plusieurs études ont montré l'importance des variabilités interannuelles de décharges de fleuves, et leur influence sur l'océan à proximité des embouchures. Gévaudan et al. (2022) se sont focalisés sur la variabilité de l'Amazone et ont montré qu'elle impactait la salinité dans la région, Chandanpurkar et al. (2022) ont montré un fort effet des variabilités des débits des plus grands fleuves mondiaux sur la hauteur de la mer. En outre la climatologie de Dai et al. (2009) n'a pas été mise à jour depuis 2009.

Ainsi il apparait que cette climatologie de décharges de fleuves est imprécise, car constituée de données éparses spatialement et ne permettent pas d'accéder à la variabilité interannuelle qui n'est pourtant pas négligeable. C'est assez récemment qu'on a cherché à produire des jeux de données de débits fluviaux plus précis, passant non pas par des mesures directes, mais par une modélisation hydrologique des surfaces continentales. Je me suis intéressé dans le cadre de cette thèse à deux modèles décrits ci-après, le modèle GloFAS et le modèle ISBA.

Ces deux modèles sont construits sur la même structure : un modèle hydrologique calcule d'abord les ruissèlements à la surface et en profondeur sur les continents, prenant en entrée de modèle des mesures de pluies, de neige, de température, etc. Puis ces flux sont intégrés dans un modèle d'écoulement qui les convertit en débits fluviaux.

a. GloFAS

Le Global Flood Awareness System (GloFAS; http://www.globalfloods.eu/)) est l'une des composantes du service de gestion des urgences Copernicus (Copernicus Emergency Management Service, CEMS). Ce système est conçu pour aider à prévenir les inondations dues aux crues à l'échelle mondiale, en fournissant notamment des prévisions de niveaux d'eau dans les bassins fluviaux. Il se base sur des données satellites, de modèles et *in situ*, intégrées dans le modèle de surface continentale HTESSEL puis dans le modèle de routage des ruissèlements LISFLOOD, comme décrit dans la Figure II.18.

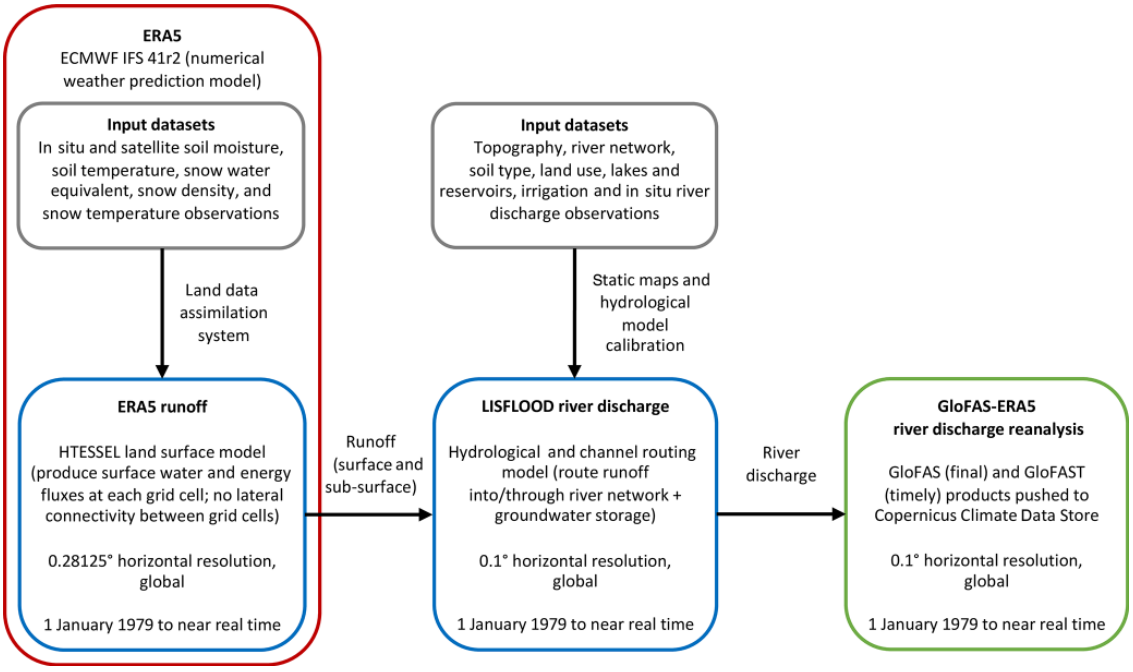


Figure II.18 : Diagramme des différents composants permettant l'estimation et la prévision des débits fluviaux par le modèle GloFAS (Harrigan et al. 2020).

Le ruissellement ERA5 est dérivé du modèle de surface terrestre HTESSEL (Hydrology Tiled ECMWF Scheme for Surface Exchanges over Land, (Scipal et al. 2009)), qui fait partie du système de prévision intégré (IFS 41r2) de l'ECMWF. Le modèle HTESSEL permet le calcul des flux d'eau et d'énergie à la surface terrestre, ainsi que des changements de température et

d'humidité du sol et du manteau neigeux au cours du temps. Les précipitations issues de la composante atmosphérique d'ERA5 (décrit plus bas) et les fontes de neiges détectées par satellites sont soit infiltrées dans le sol, discrétisé en quatre couches, soit distribuées sous forme de ruissellement de surface dans les différentes cellules de la grille horizontale en prenant en compte la texture du sol, la présence ou non de végétaux, de neige et la géomorphologie. Pour l'assimilation des observations satellites ou *in situ* telles que l'humidité et la température du sol, l'équivalent en eau de la neige, la densité de la neige et la température de la neige, ERA5 utilise un système d'assimilation de données terrestres explicité dans de Rosnay et al. (2012).

HTESSEL ne calcule cependant pas directement le débit des rivières. Pour cela, les estimations de ruissellement à chaque cellule sont ensuite connectées au modèle de routage hydrologique LISFLOOD (Burek P 2013).

LISFLOOD traite séparément les ruissèlements de surface et les ruissèlements d'eau souterraine fournis par HTESSEL. L'écoulement d'eau souterraine est simulé par deux réservoirs parallèles qui stockent et transportent l'eau vers les rivières, ce qui permet de simuler l'écoulement à deux vitesses différentes, un écoulement lent représentant le flux à long terme et un écoulement rapide. Les constantes de temps utilisées pour ces réservoirs varient géographiquement et ont été calibrées dans Hirpa et al. (2018).

En surface, le modèle LISFLOOD utilise un processus en deux étapes. Le ruissellement de surface de chaque cellule est d'abord acheminé vers la cellule du canal fluvial en aval la plus proche, puis leur transport est simulé par l'approche des ondes cinématiques. Hirpa et al. (2018) ont calibré les paramètres de débit des eaux souterraines et des cours d'eau dans GloFAS en les comparant aux observations quotidiennes de débit des cours d'eau pour 1287 bassins versants dans le monde.

LISFLOOD a la capacité notable de pouvoir représenter les éléments qui peuvent avoir un impact sur le rythme et l'ampleur du débit des cours d'eau, tels que l'utilisation de l'eau par la rivière, les lacs et les réservoirs.

b. ISBA

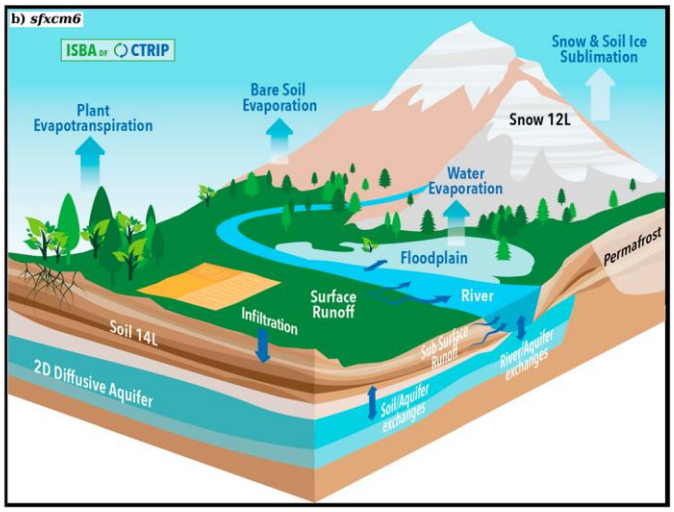


Figure II.19 : Graphique issu de (Decharme et al. 2019), décrivant le modèle ISBA et les différents flux d'eau simulés.

ISBA (Interaction Sol-Biosphère-Atmosphère) est un modèle de surface terrestre développé par le CNRM (centre national de recherche météorologique). C'est une composante de la plate-forme de modélisation SURFEX, qui représente également les surfaces urbaines, les plans d'eau et l'océan. ISBA est utilisé entre autres dans les modèles de climat du CNRM participant à CMIP6.

De la même manière que GloFAS, le produit ISBA est composé d'un modèle hydrologique ($ISBA_{DF}$) et d'un modèle de routage hydrologique (CTRIP).

Le modèle $ISBA_{DF}$ (pour Darcy-Fourier) est construit sur la base d'une résolution des lois de Darcy et de Fourier dans le sol. Ces deux lois permettent de modéliser respectivement l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux, et la diffusion de température. Elles sont résolues explicitement dans les 12 premiers mètres sous la surface, en prenant en compte les propriétés hydrauliques et thermiques du carbone organique du sol. Comme pour le modèle GloFAS, la quantité d'eau totale arrivant en surface correspond à la somme des flux provenant des précipitations et de la fonte des glaces, auquel on soustrait l'eau captée par les plantes et l'évaporation. Cette eau peut ensuite ruisseler en surface si le sol est saturé, ou bien s'infiltrer

en profondeur, et générer un ruissèlement de subsurface ou bien atteindre la nappe phréatique. Les ruissèlements sont estimés à l'aide du modèle TOPMODEL (Decharme et al. 2013) basé sur la topographie puis sont ensuite introduits dans le modèle CTRIP (CNRM version of Total Runoff Integrating Pathways), une version adaptée du modèle TRIP (Oki and Sud 1998), qui permet d'estimer l'écoulement dans les rivières grâce à la formule de Manning.

Ce modèle a été lancé dans différentes configurations de forçage, afin de tester sa sensibilité. Il apparaît que les meilleurs résultats, en comparaison aux mesures *in situ* prise dans les grands fleuves mondiaux et en termes de moyenne, de variation journalière et de rmse, sont obtenus avec le forçage Tier-2 Water Resources Re-analysis 0.25°r (WRR2) du projet E2O. Cet ensemble de données est basé sur la réanalyse ERA-Interim sur la période 1979-2014, et les précipitations mensuelles ont été ajustées avec les observations à l'aide du jeu de données Multi-Source Weighted-Ensemble Precipitation (MSWEP ; http://www.gloh2o.org) (Beck et al. 2017). Ce jeu de données est une combinaison de données *in situ* prises par des pluviomètres, des données prises par satellites et des réanalyses ERA-interim. Le biais systématique des précipitations produites est également corrigé à l'aide des mesures de décharges de fleuves.

J'ai donc utilisé cette configuration dans cette thèse. Il est important de souligner une différence majeure entre les débits GloFAS et ISBA, qui réside dans le forçage en précipitation. Le premier se base sur des données issues uniquement de la réanalyse ERA5, tandis que le second utilise également des données satellitaires. Ainsi, comme on le verra dans la section V, on constate une forte corrélation entre les variabilités interannuelles ERA5 et GloFAS et une forte corrélation entre variabilités interannuelles ISBA et IMERG (construit lui aussi sur des mesures satellitaires), provenant de cette différence en termes de forçage.

c. Comparaison des deux jeux de données

Lorsqu'on cumule tous les fleuves de la région de l'upwelling du Sénégal-Mauritanie (Figure II.20), les deux modèles hydrologiques simulent des débits similaires, avec un cycle saisonnier moyen de même amplitude. Il y a par contre des différences en ce qui concerne les anomalies interannuelles, qui ne sont pas en phase. On note par exemple une différence importante en 2017. Les différences résident également dans la répartition des débits le long de la côte. Comme on peut le voir sur la Figure II.20 les décharges fluviales ISBA sont plus concentrées

sur les fleuves les plus importants, tandis que les débits GloFAS sont plus répartis et simulent un ruissellement diffus le long de la côte.

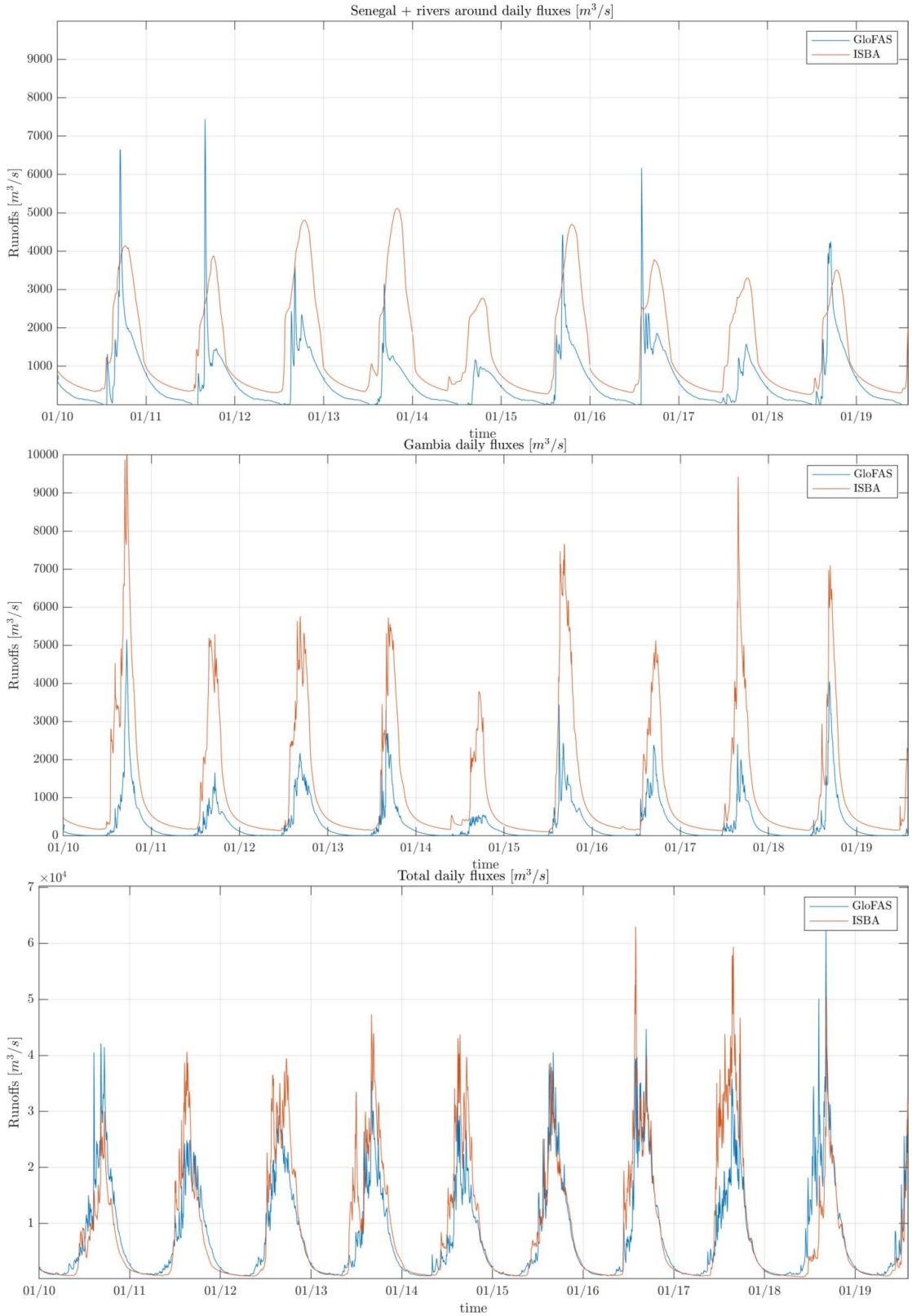


Figure II.20 : Comparaison des débits dans les rivières de la côte de l'Afrique de l'ouest, en m³/s. (haut) débit du fleuve Sénégal, (milieu) débit du fleuve Gambie et des rivières avoisinantes, (bas) débit cumulé de toutes les rivières de la région. Les courbes bleues représentent les débits GloFAS, les courbes rouges les débits ISBA.

5) Champs de précipitation

a. ERA5

ERA5 est une réanalyse produite par le Centre européen pour les prévisions météorologiques à moyen terme (ECMWF), qui fournit une modélisation complète des variables liées à l'atmosphère, la surface des continents et les vagues océaniques.

Basé sur le système de prévision intégré (IFS) Cy41r2, ERA5 est devenu opérationnel en 2016, et remplaçe l'ancienne version ERA-Interim. ERA5 offre une résolution horizontale de 31 km par rapport aux 80 km d'ERA-Interim, et couvre la période allant de 1950 à maintenant. Les données sont disponibles en sorties horaires, avec une estimation de l'incertitude grâce à l'utilisation d'un ensemble.

ERA5 utilise un système d'assimilation de données 4D-Var pour intégrer des mesures provenant de différents systèmes d'observation (mesures de stations, sondages en altitude, radiances satellitaires, etc.) dans une analyse complète de l'atmosphère, de l'océan et des surfaces terrestres. ERA5 n'assimile pas directement de données pluviométriques, mises à part des estimations composites de précipitations radar/pluviométriques sur les États-Unis à partir de 2009.

D'importantes améliorations dans la paramétrisation de la microphysique et des nuages et de la convection ont été apportées dans ERA5 (Hersbach et al. 2020). Ceci et l'augmentation de la résolution (31 km au lieu de 80 km) impliquent des améliorations dans la représentation de la dynamique à mésoéchelle et des précipitations, par rapport à l'ancienne version ERA-Interim.

Dans le cadre de cette thèse, les différentes variables atmosphériques de ERA5 ont été utilisées en entrée du modèle CROCO. Je me suis intéressé personnellement uniquement à l'estimation des précipitations par ERA5. La valeur de précipitation utilisée est composée du champ de précipitations convective (cp), produit par le schéma de convection de l'IFS, qui représente les précipitations à des échelles inférieures à la grille, et le champ de précipitation stratiforme (sp), produite par le modèle de nuage de l'IFS, qui représente la formation et la dissipation des nuages et des précipitations à grande échelle en raison des changements dans les variables atmosphériques (telles que la pression, la température et l'humidité). Ce champ est à l'échelle de la maille de la grille ou plus grande. Ces champs de précipitation sont donnés en mètre, et correspondent à l'épaisseur de la masse d'eau cumulée sur un pas de temps, si elle était uniformément répartie sur un pixel.

Une étude récente par Lavers et al. (2022) propose une validation à l'échelle globale des estimations de précipitation ERA5. Les résultats de cette étude, basée sur des observations prises dans des stations réparties sur les continents et sur les îles, mais pas sur l'océan, montrent que les incertitudes de ces champs de précipitations sont fortes sur la région tropicale et notamment au niveau de l'ITCZ, avec des coefficients de corrélation de Spearman inférieurs à 0.5, et qu'il existe une tendance à la sécheresse en Afrique de l'Ouest en raison de la difficulté qu'a le modèle à gérer les systèmes convectifs de mésoéchelle.

b. IMERG

Pour estimer la sensibilité du modèle CROCO aux différents forçages de pluie, j'ai également utilisé les précipitions estimées par l'algorithme IMERG (Integrated Multi-satellitE Retrievals for GPM), et j'ai calculé un champ climatologique à partir de ces précipitations.

IMERG est un produit construit sur les mesures satellitaires de précipitation. Il combine les mesures prises par la constellation de satellites micro-ondes GPM (Global Precipitation Measurement) (Hou et al. 2014), avec des données de satellites infrarouges prises par des satellites géostationnaires.

GPM est une constellation de satellites centrés sur le satellite GPM core, qui est doté d'un radiomètre micro-ondes et d'un radar en bande Ka et Ku, permettant une mesure à plus haute résolution des cellules de pluie. Il succède à la mission TRMM (2000-2015) qui fonctionnait sur le même principe avec un radar en bande Ku uniquement. Ces satellites ont une orbite polaire et permettent une estimation de la pluie toutes les 3 heures.

Les mesures IR de la constellation de satellites géostationnaires fournissent des mesures de précipitation à une résolution temporelle plus élevée, avec une couverture IR globale toutes les demi-heures. Les mesures de pluie par infrarouge reposent sur l'hypothèse que l'intensité des précipitations est inversement proportionnelle à la température au sommet des nuages. Bien que cette hypothèse soit valable avec un lissage temporel et spatial, l'incertitude sur les mesures individuelles est beaucoup plus élevée que celle des mesures de pluie radar (Arkin and Meisner 1987).

IMERG tire profit de ces deux types de mesure de précipitation, micro-onde radar des satellites TRMM et GPM et les mesures infrarouges, afin de fournir une estimation précise du taux de pluie à une fréquence de 30 minutes. L'algorithme est basé sur la méthode de morphing du Climate Prediction Center Morphing (CMORPH (Joyce et al. 2004)), et tire parti de la forte répétition des satellites IR pour suivre le déplacement des cellules pluvieuses détectées par radar, de façon moins fréquente mais plus précise.

c. Comparaison des deux jeux de données

Les deux champs de précipitations utilisés sur la région de l'Afrique de l'Ouest montrent des répartitions moyennes similaires, avec un maximum d'eau cumulée le long de l'ITCZ (Figure II.21). On observe cependant une variabilité plus forte des pluies IMERG, qui contient davantage de valeurs de précipitations extrêmes, supérieures à 0.02 m/jour. Les cellules de pluie ERA5 sont en général plus lissées. La génération d'un champ climatologique moyen de précipitation a tendance à très fortement lisser les précipitations, sur l'histogramme Figure II.22 on observe une grande quantité de valeurs moyennes supérieures à zéro et inférieures à 0.01 m/jour, et aucune valeur au-dessus de 0.02 m/jour.

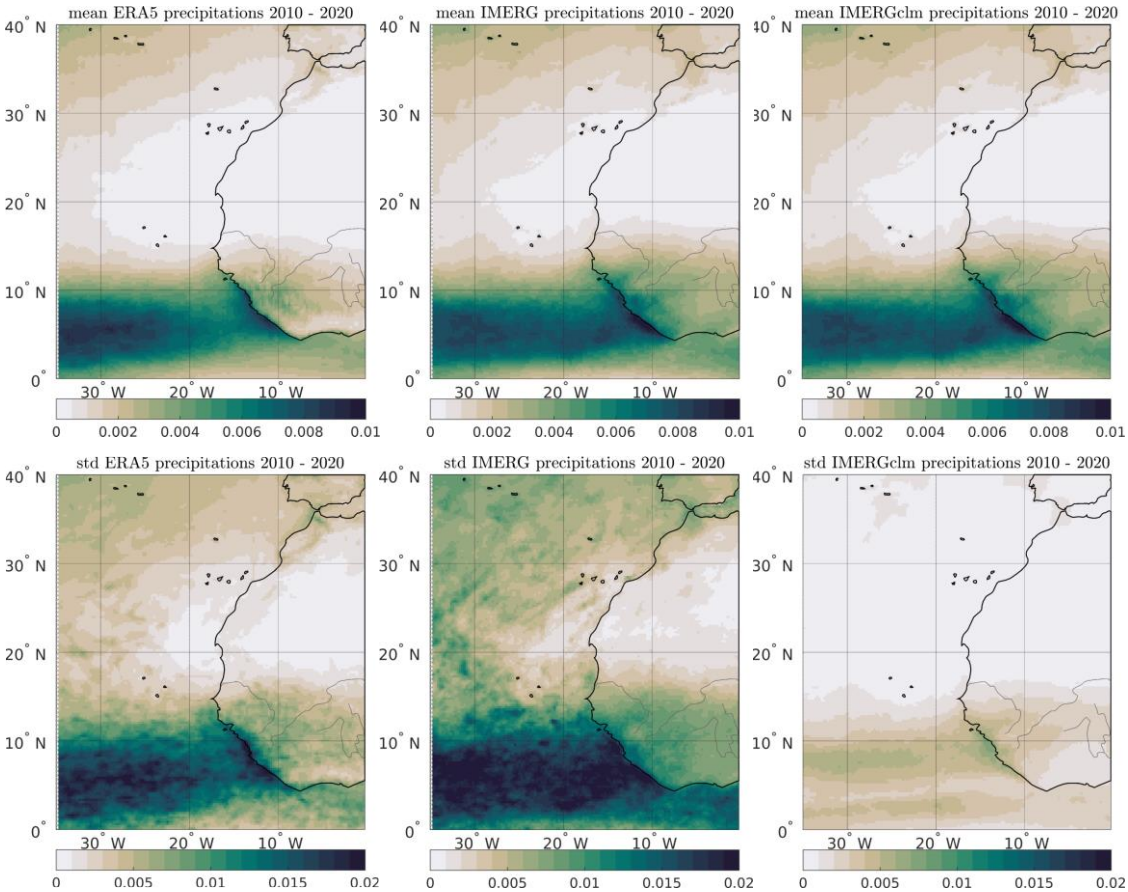


Figure II.21 : Distribution des forçages de précipitations ERA5 (à gauche) et IMERG (au milieu) et du forçage climatologique de précipitations utilisé dans la simulation CROCOprclm (à droite). Précipitations moyennes entre 2010 et 2019 (en haut), écart-type des précipitations sur la même période (en bas). Ces cartes sont données en m/jour.

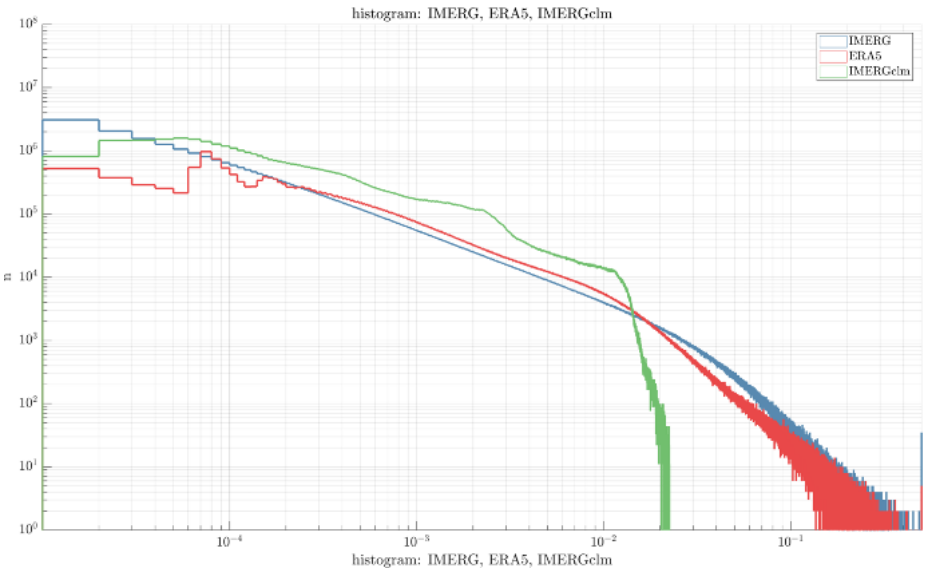


Figure II.22 : Histogramme des champs de précipitations ERA5 (rouge), IMERG (bleu) et climatologiques utilisés dans la simulation CROCOprclm (vert), en m/jour. Les échelles sont logarithmiques.

6) Définition du vocabulaire relié aux incertitudes

Dans cette thèse, la problématique de l'incertitude de la donnée de SSS satellitaire est centrale. Afin de bien clarifier ce qu'est une incertitude je donne ici quelques définitions, qui découlent du Comité commun pour les guides en métrologie (JCGM (2008)).

- **Le mesurande** est la quantité que l'on cherche à mesurer. Dans notre cas, le mesurande est la salinité de la surface de la mer.
- **La divergence** est la différence entre les données et la valeur de validation, et le **biais relatif** la valeur moyenne de cette divergence.
- **La précision** d'une mesure est la différence entre un résultat et la moyenne de plusieurs résultats obtenus par la même méthode, c'est donc une estimation de la reproductibilité d'une mesure.

- **L'erreur** sur la mesure correspond à la différence entre la valeur réelle du mesurande, et la valeur mesurée. La valeur réelle du mesurande n'étant pas connue, il est impossible de connaître la valeur réelle de l'erreur.

- **L'incertitude** est le paramètre, associé au résultat d'une mesure, qui caractérise la dispersion des valeurs qui pourraient raisonnablement être attribuées au mesurande. L'incertitude de mesure provient de différentes sources :

Incertitudes liées aux effets systématiques : Lors de la comparaison de plusieurs champs satellitaires, chacun des champs a subi un processus d'étalonnage et de corrections de biais systématiques. Il peut cependant rester des biais résiduels qui engendrent une incertitude lorsqu'on cherche à comparer ces mesures.

On distingue ces incertitudes systématiques des incertitudes liées aux erreurs aléatoires, qu'il est difficile de quantifier compte tenu de la connaissance actuelle des sources d'erreurs, et sur lesquelles j'ai en particulier travaillé. Dans cette thèse je me suis intéressé à deux sources d'erreurs aléatoires.

Incertitudes liées aux erreurs d'observation : Les erreurs d'observation sont celles qui correspondent à la précision des instruments, auxquelles s'ajoutent, le cas échéant, celles dues à un étalonnage absolu inexact. Dans le cas de la comparaison des SSS satellitaires aux SSS *in*

situ, il y a deux erreurs d'observations liées aux deux types de mesure utilisés. La précision des SSS *in situ* est généralement considérée comme inférieure à 0,01 pss pour une mesure individuelle, mais il peut subsister des biais systématiques de plusieurs dixièmes de pss sur certains enregistrements de TSG (voir Figure II.25). Pour la SSS satellitaire, l'erreur absolue d'étalonnage est généralement inconnue, et la précision est de l'ordre de 0,4 pss pour Aquarius, et de 0,6 pss pour SMOS et SMAP, pour les mesures de SSS individuelles prises dans les régions chaudes. Ces erreurs d'observation sont réduites aux niveaux 3 et 4 en fonction du nombre de passages du satellite dans le même pixel au cours d'une semaine, d'un facteur 2 pour Aquarius et d'un facteur 2 à 3 pour SMOS et SMAP.

Incertitudes liées aux erreurs d'échantillonnage : Les erreurs d'échantillonnage surviennent lorsqu'on cherche à comparer deux types de données qui ne représentent pas les mêmes processus (ou les mêmes échelles), par exemple en raison des différences dans leurs échantillonnages spatiaux et/ou temporels (Merchant et al. 2017, Vinogradova et al. 2019). Les erreurs d'échantillonnage sont les différences « attendues » entre les deux mesures, la limite à laquelle deux estimations peuvent différer du fait de leurs échantillonnages différents.

Dans le cas de cette thèse, on compare des SSS satellitaires, correspondant à des mesures dans le premier centimètre de la surface de la mer et intégrées sur une surface qui dépend des caractéristiques du radiomètre et du traitement des données, estimée à typiquement 50 km x 50 km dans le cas des CCI, et des SSS *in situ* mesurées à une profondeur de plusieurs mètres et de manière ponctuelle. Ainsi des erreurs d'échantillonnage sont inévitables mais ne peuvent pas être connues exactement. Le but de ma première étude (section III) est de quantifier les incertitudes liées à ces erreurs, et de les prendre en compte dans le processus de validation des données satellitaires.

7) Méthodes de colocalisations

Une autre problématique de la comparaison entre données *in situ* et satellitaires concerne le suréchantillonnage *in situ* par rapport aux mesures satellitaires. C'est le cas par exemple des mesures de TSG qui peuvent capter plus de 50 mesures sur un seul pixel satellite, ou bien des données de mouillages qui peuvent être horaires tandis que les mesures satellitaires sont, pour les données de niveaux 3 ou 4, moyennées sur une période de plusieurs jours. D'autre part, les données satellites sont disponibles sur des grilles suréchantillonnées, c'est-à-dire que la maille de la grille est plus fine que la résolution effective du satellite. Dans le cas de SMOS par exemple, les données sont disponibles sur une grille à 25 km mais la résolution du satellite est d'à peu près 50km. Ainsi pour comparer des valeurs lissées de manière similaire et pour s'assurer que les validations effectuées sont indépendantes entre elles, sans surreprésentation des données *in situ*, j'ai choisi de centrer les validations sur les données satellitaires plutôt que sur la donnée *in situ*, en procédant comme suit (méthode illustrée en Figure II.23 et Figure II.24).

Je procède d'abord à un lissage spatial des données *in situ*, important surtout pour les données à très bonne résolution spatiale telles que les mesures de TSG. Pour chaque pixel satellite, les mesures *in situ* trouvées à proximité du pixel sont moyennées avec une pondération similaire à celle de la mesure satellitaire. Par exemple pour SMOS, on moyenne les données *in situ* trouvées à moins de 100 km autour du centre du pixel, avec une pondération gaussienne d'écart-type de 12.5km. Ainsi, 95 % de la pondération se trouve dans un rayon de 25 km autour du centre du satellite, et les queues de distribution permettent de simuler l'utilisation de quelques données à plus de 25km du centre du pixel pendant le processus d'inversion de la salinité.

Ce lissage spatial n'a pas d'impact sur les données *in situ* isolées, comme les mesures de flotteurs argo pour lesquelles il est très rare d'avoir plusieurs mesures synchronisées à moins de 100 km de distance. Dans ce cas cela revient à comparer la valeur *in situ* non moyennée à la valeur du pixel satellite le plus proche.

On procède simultanément à un lissage temporel des données *in situ*, qui est important pour les mesures à bonne résolution dans le temps et se déplaçant peu géographiquement, telles que les mesures aux mouillages. Les mesures satellites sont en général lissées sur une période τ de plusieurs jours. Pour chaque date satellite disponible, on utilise les mesures obtenues par le premier lissage spatial à des dates proches, éloignées dans le temps de moins de $t_{max} = \tau/2$

jours avant ou après la date observée. Ces données sont moyennées avec une pondération identique à celle utilisée pour construire la donnée satellitaire. Pour les champs SMOS CATDS par exemple, les mesures *in situ* à plus ou moins 4.5 jours sont moyennées avec une pondération gaussienne. Ce lissage temporel n'a en général pas d'impact sur les données *in situ* mouvantes telles que les mesures des flotteurs argo ou des TSG car il est rare qu'il y ait plusieurs mesures au même point à quelques jours d'intervalle. Dans ce cas cette méthode revient à comparer la donnée satellite la plus proche en temps de la mesure *in situ*.

La méthode peut s'exprimer comme suit :

Pour p un pixel de la grille en 2 dimensions et T une date à laquelle le champ en 2 dimensions est disponible,

Pour les N mesures *in situ* $s_{x,t}$ éloignée en distance de moins de d_{max} du centre du pixel p et en temps de moins de t_{max} de la date T, la valeur *in situ* colocalisée $\widehat{S_{p,T}}$ s'exprime par :

$$\forall\, s_{x,t}\Big|_{|x-p|<d_{max},\ |t-T|<t_{max}}$$
$$\widehat{S_{p,T}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \alpha(|x_i - p|).\beta(|t_i - T|).s_{x_i,t_i}}{\sum_{i=1}^{N} \alpha(|x_i - p|).\beta(|t_i - T|)} \qquad \text{(II.13)}$$

Avec α et β les pondérations spatiale et temporelle respectivement.

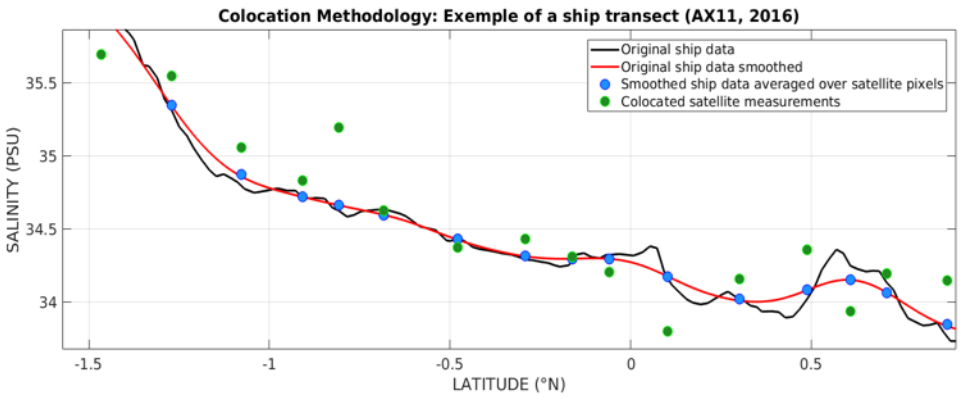


Figure II.23 : Exemple de colocalisation de mesures de TSG. La mesure originale (en noir) subit un lissage (rouge) et est ensuite comparée aux pixels satellites traversés.

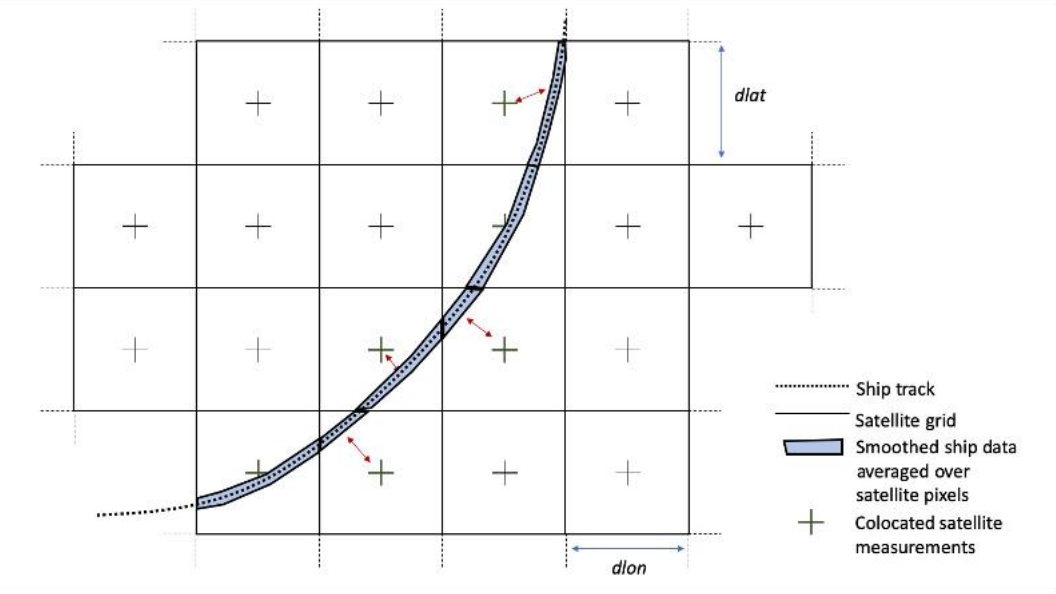


Figure II.24 : vision en 2 dimensions de la colocalisation d'un champ donné sur une grille (+) à des mesures de TSG.

Il est fréquent d'utiliser les données *in situ* telles que les mesures Argo ou des TSG à des fins de validation de données satellites. C'est par exemple ce qui est entrepris dans le cadre du Pi-Mep (Guimbard et al. 2021) dont le but est de qualifier les différents champs satellitaires de SSS disponibles. Cependant, il est parfois possible d'inverser le processus et de valider les données *in situ* à l'aide de données satellitaires. C'est arrivé par exemple dans le cadre de mon étude de la variabilité de la salinité en Afrique de l'Ouest, où j'ai pu détecter et signaler un trajet bateau aberrant en le comparant à des données de SSS satellitaires. Ce trajet est visible sur la Figure II.25.

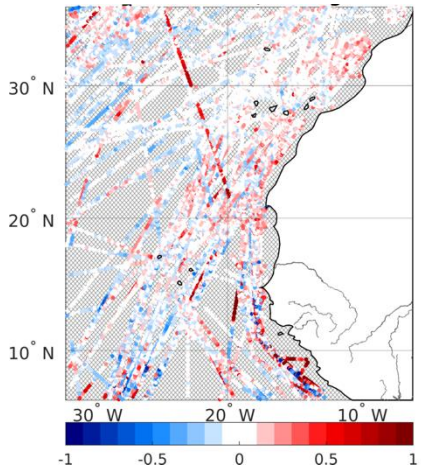


Figure II.25 : colocalisations CCI - SSS mesurées par les TSG en Afrique de l'Ouest. Le trajet faux présentant un biais négatif des données in situ *part du large du Cap blanc vers le Nord-Ouest.*

8) Méthode de calcul de la variabilité GLORYS

a. Calcul de la variabilité de la SSS sous la résolution des champs satellitaires à partir d'un modèle

On l'a vu, la différence d'échantillonnage entre les données *in situ* et les données satellitaires engendre une erreur lorsqu'on compare ces deux types de données, et il est impossible de la connaître exactement car on ne connait pas la valeur réelle de la SSS mesurée. On peut cependant déterminer l'incertitude sur la comparaison liée à ces erreurs, en estimant la variation attendue entre les deux types de mesure ayant des caractéristiques spatiotemporelles différentes. Cela revient à estimer au mieux la variabilité d'une SSS avec un échantillonnage très fin dans la zone couverte par le pixel satellite.

Cette variabilité n'est pas constante, elle est variable temporellement et géographiquement. Pour caractériser la variabilité de la SSS à l'intérieur des pixels satellitaires, à l'échelle globale et sur toute la période d'observation satellite, j'ai utilisé la salinité estimée par la simulation GLORYS. Comme les mesures *in situ* sont généralement prises à une profondeur variant entre 5 et 10 m, j'ai utilisé les données du modèle à 5 m de profondeur.

L'intérêt de cette simulation est qu'elle offre un bon compromis entre une résolution suffisante (1/12°) pour quantifier la variabilité de la salinité sous l'échelle satellitaire (nommée parfois variabilité subpixel), et un volume de données assez limitée pour faire une étude à l'échelle globale. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle est dépendante de la qualité et de la précision du modèle.

Je calcule donc la variabilité de la SSS comme ceci (voir schéma Figure II.26) :

Pour chaque pixel de la donnée satellite, tous les points de grille du modèle inclus à l'intérieur de la résolution spatiotemporelle du satellite (50km et 7 jours ou 30 jours dans le cas des champs CCI) sont pris en compte, et l'écart-type de ces données permet d'estimer la variabilité de la SSS entre l'échelle satellitaire et l'échelle du modèle.

Afin d'estimer sur quelle dimension la SSS est la plus variable, j'ai calculé cet écart-type à différentes échelles, listées ci-dessous :

- Échelle spatiale uniquement, sans prendre en compte la dimension temporelle
- Échelle temporelle uniquement, sur 7 ou 30 jours, calculée sur le point de grille du modèle le plus proche.

- Échelle spatiotemporelle sur 7 ou 30 jours.
- Échelle unidirectionnelle, le long de 4 lignes traversant le pixel, comme décrit dans la Figure II.26.

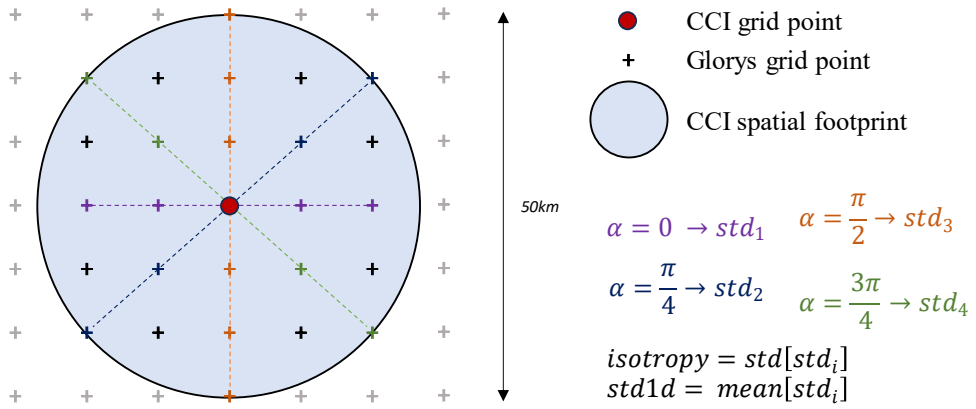


Figure II.26 : Schéma montrant le calcul de la variabilité de la SSS entre l'échelle satellitaire et l'échelle de la simulation GLORYS, ainsi que la variabilité en 1 dimension, et le calcul d'anisotropie.

J'ai également calculé pour chacune de ces échelles des métriques décrivant la distribution de la SSS : le kurtosis, qui donne une information sur l'aplatissement de la distribution, et le skewness, qui informe sur l'asymétrie de la distribution. Enfin un paramètre donnant une information sur l'anisotropie de la distribution est calculé. Il correspond à l'écart-type des variabilités calculées sur chacune des lignes unidirectionnelles décrites ci-dessus. Plus ce paramètre à une valeur forte, plus la distribution de SSS observées est anisotrope.

Des comparaisons de ces différents champs seront montrées dans la Section III.2). La Figure II.27 montre un exemple de variabilité de la SSS sous la résolution des champs satellitaires CCI hebdomadaires, donc l'écart-type de la SSS dans des pixels de 50 km et sur 7 jours.

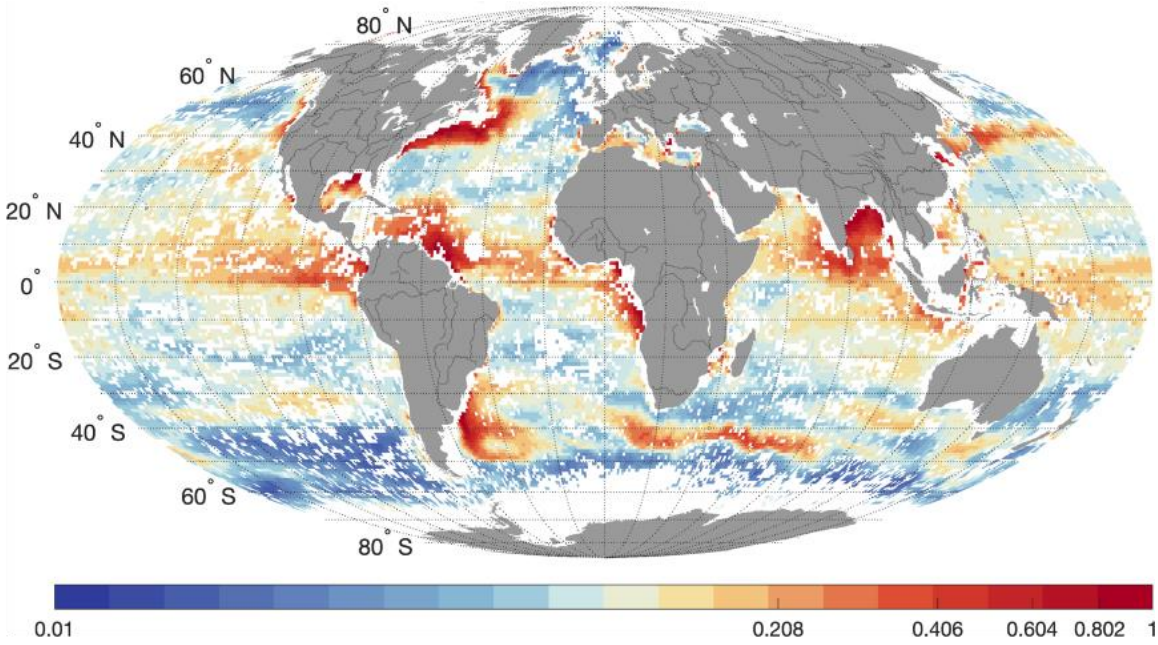


Figure II.27 : variabilité de la SSS dans 50 km et 7 jours en pss, estimée à l'aide de la simulation GLORYS, moyennée sur 2010 – 2020. Échelle logarithmique.

b. Extrapolation de la variabilité vers les échelles inférieures

Cependant, l'écart-type estimé par la méthode décrite ci-dessus donne uniquement une idée la variabilité attendue de la salinité entre l'échelle du satellite et celle de la simulation, donc à 1/12°, la variabilité sous cette échelle n'est pas prise en compte. Pour affiner ce calcul et estimer la valeur de la variabilité totale à l'intérieur des pixels, j'ai mis en place une méthode spectrale, en considérant le spectre de puissance de la salinité (voir Figure II.28 provenant de D'Addezio et al. (2019)). Cette méthode, décrite ci-dessous, consiste à extrapoler la variabilité calculée à la première étape vers des échelles extrêmement fines, en considérant une pente de spectre de puissance constante en tout point du globe (ce qui est une première approximation).

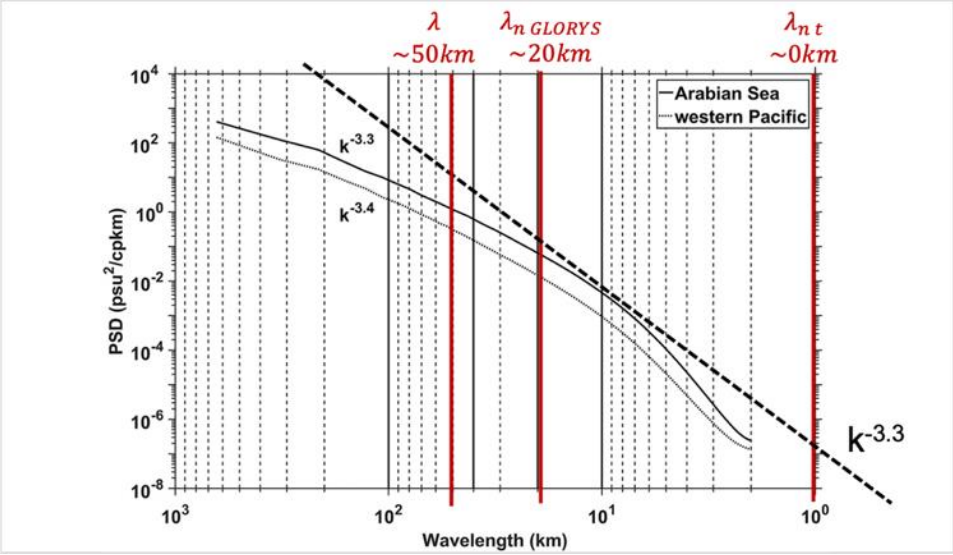


Figure II.28 : Spectre de puissance de la salinité provenant de D'Addezio et al. (2019) utilisé pour extrapoler la variabilité subpixel jusqu'à l'échelle d'un km.

La variance d'un signal entre une longueur d'onde choisie et la longueur d'onde de Nyquist peut être déduite en supposant que la pente du spectre entre les deux longueurs d'onde est raisonnablement connue.

La variance d'un signal est définie comme l'intégrale de son spectre :

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} \int_{-\pi}^{\pi} \overline{PSD}(k) k d\theta dk} \qquad \text{(II.14)}$$

où $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, k_n est le nombre d'ondes de Nyquist.

On considère que la densité spectrale de puissance de la salinité a une échelle de loi de puissance (D'Addezio et al. 2019), (Guimbard et al. 2021)

$$y(k) = b * k^{-m} \qquad \text{(II.15)}$$

où m correspond à la pente logarithmique de la densité spectrale de puissance, et b est l'ordonnée à l'origine de la densité spectrale de puissance.

L'introduction de (*II.14*) dans (*II.15*) donne

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} \int_{-\pi}^{\pi} b * k^{-m} k d\theta dk} \quad \text{(II.16)}$$

Et, en intégrant par rapport à θ,

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} 2\pi b k^{1-m} dk} \quad \text{(II.17)}$$

Et par rapport à k,

$$\sigma_k = \sqrt{\frac{2\pi b}{m-2}\left(k^{2-m} - {k_n}^{2-m}\right)} \quad \text{(II.18)}$$

On peut exprimer cette formule en fonction de la longueur d'onde :

$$\sigma_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi b}{m-2}\left(\lambda^{m-2} - {\lambda_n}^{m-2}\right)} \quad \text{(II.19)}$$

Dans cette équation, λ est la longueur d'onde en dessous de laquelle on calcule la variance, λ_n est la longueur d'onde de Nyquist.

On souhaite estimer l'influence d'un changement de la longueur d'onde de Nyquist sur la variance de la salinité en dessous d'un nombre d'onde de 50 km. On calcule donc σ_{50} pour $\lambda_n = 20km$, ce qui correspond à la STD supposée effectivement simulée par GLORYS, et σ_{50} pour $\lambda_n = 0km$, ce qui correspond à un cas parfait où toute la puissance du signal est prise en compte.

Des études spectrales dans la mer d'Arabie et dans le Pacifique occidental (D'Addezio et al. 2019), ainsi que dans l'océan Atlantique tropical et subtropical (Kolodziejczyk et al. 2015) suggèrent que pour une longueur d'onde inférieure à 50 km, les spectres de salinité ont une pente proche de m=3,3. Ceci est assez proche d'une loi de puissance k^{-3} attendue pour un traceur passif sous l'influence de l'advection, la pente légèrement plus raide étant probablement attribuable aux processus atmosphériques (D'Addezio et al. 2019). Même si cette pente est susceptible de varier légèrement d'un moment à l'autre et d'un endroit à l'autre, je l'utilise pour déduire un ordre de grandeur du rapport entre la variabilité attendue dans le cas où toutes les

longueurs d'onde inférieures à 50 km sont prises en compte, Umis, et la variabilité estimée avec la résolution de la réanalyse GLORYS, Umis_glo, à l'aide de l'équation (*II.19*). On trouve la relation suivante :

$$U_{mis} = 1.1985 U_{mis_glo} \qquad \text{(II.20)}$$

Pour vérifier la fiabilité de cette estimation de la variabilité de la salinité dérivée de la réanalyse GLORYS, on la compare aux variabilités de la salinité mesurées *in situ* par des capteurs embarqués sur des navires. En effet, les mesures du ThermoSalinoGraph (TSG) sont échantillonnées à une résolution de quelques kilomètres le long des transects des navires, ce qui permet une estimation de la variabilité à une résolution plus élevée que GLORYS. J'utilise le jeu de données du SNO SSS (Alory et al. 2015) décrit en section II.2.b. On utilise pour cela l'estimation unidirectionnelle de la variabilité GLORYS (voir Figure II.26), et on compare la variabilité de SSS dans la direction la plus proche de celle du TSG.

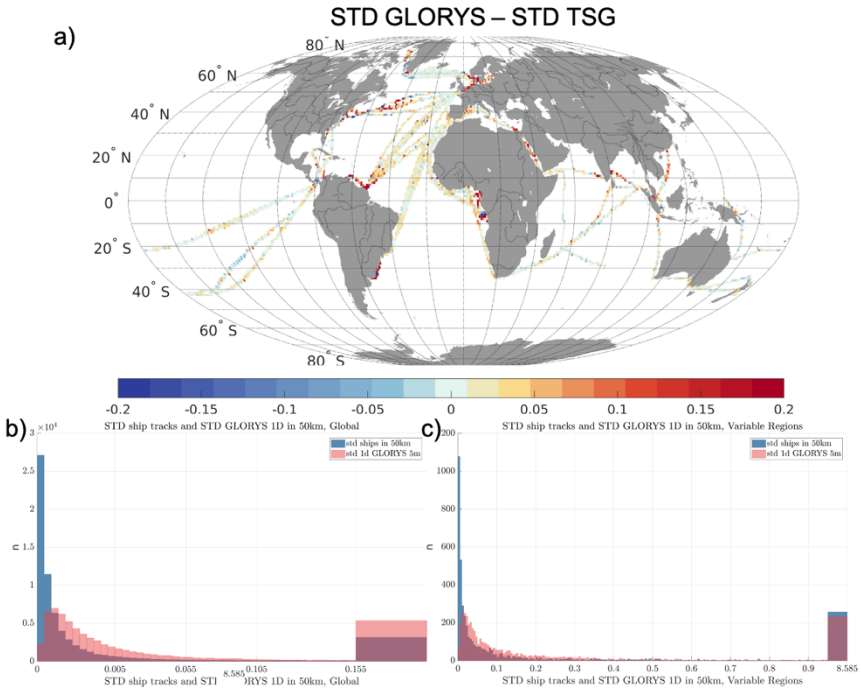


Figure II.29 : Comparaison des variabilités unidirectionnelles calculées à l'aide de la simulation GLORYS aux variabilités des TSG : a) carte des différences, b) histogramme des variabilités GLORYS (rouge) et TSG (bleu) à l'échelle globale, c) idem dans les régions variables (Gulf Stream, Amazone et Congo).

La variabilité GLORYS comparée à la variabilité TSG dérivée le long des lignes des navires marchands (Figure II.29) indique que les différences sont faibles, inférieures à 0,02 pss pour la plupart des mesures, la variabilité GLORYS étant généralement légèrement supérieure à la variabilité *in situ*. La différence est plus importante dans les régions à forte variabilité telles que

les fronts ou les panaches fluviaux, mais reste inférieure à ~20 %, comme le montre l'histogramme de la Figure II.29c. Ce résultat semble contre-intuitif car on s'attendrait à ce que la variabilité de la salinité de GLORYS soit plus faible, étant donné que la résolution de la réanalyse est plus faible que la résolution des mesures des navires et que la contribution pour les petites échelles non résolues par GLORYS n'a pas été ajoutée dans ces comparaisons. Cela peut provenir du lissage de GLORYS sur une journée, alors que les données du TSG sont instantanées. D'autre part les données GLORYS assimilent des données *in situ*, ce qui peut générer un bruit.

c. Méthode de validation des incertitudes

Ce calcul de variabilité de la salinité correspond à la valeur de l'incertitude liée à la différence d'échantillonnage entre les données satellitaires et les données *in situ* ponctuelles. La connaissance de cette valeur permet de clore le budget total d'incertitudes sur la validation des champs satellitaires. En effet, les autres incertitudes sur ces comparaisons sont :

Usat, l'incertitude sur la mesure satellitaire, qui est estimée par propagation des incertitudes de chacune des mesures satellitaires utilisées pour générer les champs de niveau 4 CCI+SSS.

Uref, l'incertitude sur la mesure *in situ*, qui est comme on l'a vu plus haut d'un ordre de grandeur inférieure à l'incertitude satellitaire, et que j'ai négligé.

La connaissance des différentes sources d'incertitudes permet de mettre en place une méthode de validation couplée de la mesure satellitaire et de son incertitude. Cette méthode s'appuie sur Merchant et al. (2017), qui montre que si les incertitudes sont bien estimées, l'équation suivante est vérifiée.

$$STD\left(\frac{x_{sat} - x_{ref}}{\sqrt{{U_{sat}}^2 + {U_{mis}}^2 + {U_{ref}}^2}}\right) = 1 \qquad \text{(II.21)}$$

Où x_{sat} et x_{ref} sont les données satellitaires et *in situ*, Usat l'incertitude de la donnée satellitaire, Umis l'incertitude due à la variabilité subpixel qui induit une erreur d'échantillonnage, Uref l'incertitude sur la donnée *in situ* que j'ai négligé.

L'équation (*II.21*) est valable lorsqu'on dispose d'un nombre élevé de mesures, et est donc applicable sur des régions de grandes tailles. Afin d'effectuer une analyse plus locale des incertitudes, j'ai cherché à évaluer également la STD des différences normalisées comme dans l'équation (*II.21*) dans des boîtes de 2° réparties sur la surface globale des océans. Cependant, en raison du nombre réduit de mesures argo dans les boîtes de 2°, il n'est pas possible d'estimer de manière fiable la distribution des différences normalisées dans chaque boîte.

Pour valider la distribution avec des échantillons peu nombreux, j'ai considéré les histogrammes des variances, qui correspond au carré de l'écart-type, multipliés par le nombre de mesures.

En effet, pour $X1, \cdots, Xn$ un échantillon aléatoire d'une distribution gaussienne dans n'importe laquelle des boîtes de 2°, avec une moyenne μ et un écart-type σ $N(\mu, \sigma^2)$, la variable aléatoire

$$Y = (n-1)S^2/\sigma^2 = n\,Var(X)/\sigma^2 \qquad \text{(II.22)}$$

suit une distribution χ^2_{n-1} avec

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{1}^{n}(X_i - \bar{X}) \qquad \text{(II.23)}$$

(Voir p211 de Emery and Thomson (2001))

Ce choix de représentation permet de comparer les histogrammes obtenus à une courbe théorique que la variable Y devrait suivre si les distributions des différences normalisées dans chaque boîte suivaient une distribution gaussienne, comme attendu si les incertitudes sont correctement estimées. La courbe théorique est déduite en cumulant les distributions du terme Y attendu pour chacune des boîtes de 2°, en considérant σ=1.

Cette méthode permet donc de valider le couple x_{sat} et U_{sat}. Elle ne permet cependant pas, dans le cas d'un écart-type éloigné de 1, de dire lequel de ces deux paramètres n'est pas valable. D'autre part, ce calcul part du principe que U_{mis} est une estimation correcte de la variabilité de la SSS sous l'échantillonnage satellitaire, or cette valeur est comme on l'a dit très dépendante de la simulation utilisée. Dans un but de vérification des résultats obtenus, j'ai calculé U_{mis} avec d'autres simulations également, issues du modèle CROCO dans la région de l'Afrique de

l'ouest et dans la région du panache de l'Amazone. Ces tests donnent des résultats similaires à ceux obtenus avec GLORYS, comme on le verra dans la section III.4).

9) Analyse spectrale de la SSS

Le but de cette étude est de quantifier à la fois la variabilité de la SSS non accessible avec les mesures satellitaires actuelles et qui serait accessible avec une mission haute résolution, et à identifier les revisites temporelles qui permettraient de pleinement caractériser cette variabilité. À cette fin, j'ai développé, en collaboration avec Jean-Luc Vergely, une méthode de calcul de spectre en deux dimensions. En effet, s'il est commun de calculer des spectres à une dimension, dans le domaine temporel ou dans le domaine spatial, il est beaucoup plus rare d'estimer la puissance spectrale dans l'espace des fréquences temporelles et spatiales simultanément.

Je présente cette analyse spectrale bidimensionnelle de la salinité, dans la partie IV de ce manuscrit. On s'intéresse notamment aux spectres spatiotemporels dans quatre régions choisies pour leur diversité en termes de variabilité de la SSS, et leurs rayons de déformation de Rossby moyens. Ces quatre régions sont le panache de l'Amazone, le panache du Rio de la Plata, le Gulf Stream et l'Atlantique subtropical (voir les cartes Figure IV.4).

Pour ces études, nous avons utilisé des simulations de modèles océaniques à haute résolution. Nous avons débuté l'étude avec la simulation APLUME36 (section II.3.c) sur l'Atlantique tropical, puis, pour avoir des résultats sur des régions où le rayon de déformation de Rossby est plus petit, nous avons étendu l'étude en utilisant les simulations GIGATL (section II.3.d).

Les spectres de puissance des fluctuations en SSS dans le plan des fréquences spatio-temporelles, ainsi que dans la dimension spatiale et temporelle uniquement ont été calculés selon la méthode suivante :

La première étape consiste à interpoler les sorties de modèles sur une grille spatiale régulière, avec une résolution de 2 kilomètres. Ensuite, une moyenne temporelle est soustraite à chaque point de données, ce qui aboutit à la création d'une carte 2D illustrant les fluctuations de la salinité dans l'océan. Cette carte est une représentation spatiale des fluctuations de salinité en fonction du temps, créant ainsi un cube de données tridimensionnel noté dSSS(x, y, t).

La deuxième étape consiste à apodiser le cube de données dSSS(x, y, t) à l'aide d'une fenêtre de Hann, ce qui vise à réduire les artefacts de bord. Ensuite, une transformée de Fourier rapide (FFT) est calculée sur les données apodisées. Cette FFT permet de convertir les données spatiales et temporelles en une représentation dans le domaine des fréquences spatiales (fx, fy) et temporelles (ft). Le module de la transformée de Fourier fournit la puissance du signal aux différentes fréquences.

On effectue ensuite une intégration en fonction de la fréquence spatiale radiale (fr), qui est calculée comme la racine carrée de la somme des carrés des fréquences spatiales dans les directions x et y (fx et fy). Cette étape permet de se projeter dans un plan spatio-temporel (fr, ft), ce qui facilite l'interprétation de la distribution des fréquences spatiales.

Ces spectres à deux dimensions sont étudiés pour comprendre les liens entre la puissance dans le domaine temporel et dans le domaine spatial. On intègre également ces spectres en fonction de la fréquence spatiale radiale (fr) ou de la fréquence temporelle (ft) afin d'obtenir des spectres de puissance unidimensionnels (1D). Ces spectres de puissance 1D représentent la répartition de la puissance dans l'espace des fréquences spatiales ou temporelles, une représentation plus classique des spectres dans chacun des espaces.

Il existe plusieurs normalisations possibles pour exprimer un spectre de puissance. Dans cette étude encore préliminaire, nous avons adopté diverses unités pour présenter nos résultats. En ce qui concerne le traitement des données issues de la simulation APLUME36, les spectres sont exprimés en unité de variance (pss^2), sans normalisation par les fréquences. Pour le traitement des données issues du modèle GIGATL, nous avons normalisé les spectres par les fréquences spatiales et temporelles. Cela permet de garantir que l'intégrale de la puissance sur l'ensemble des fréquences est équivalente à la variance totale des perturbations de la salinité présentes dans le cube de données. Les spectres de puissance sont exprimés en pss^2/cpkm/cpd, où "cpkm" représente les cycles par kilomètre et "cpd" les cycles par jour.

10) Traitement des salinités issues du modèle CROCO dans la région de l'Afrique de l'Ouest

a. Équation bilan de la salinité

La surface des océans est le lieu de nombreuses interactions avec l'atmosphère. C'est notamment dans la couche de surface qu'ont lieu les échanges d'eau douce, via les précipitations, l'évaporation et les décharges de fleuves, et les échanges de chaleur. Le vent de surface génère également des vagues et des courants, qui ont pour effet de mélanger et d'homogénéiser l'océan jusqu'à une certaine profondeur variant généralement entre quelques mètres et quelques centaines de mètres. Cette couche de surface est appelée la couche de mélange. Dans mon étude des processus en Afrique de l'Ouest je m'intéresse à l'évolution de la salinité dans cette couche, car cela permet d'observer comment les flux d'eau douce provenant de l'atmosphère modifient l'océan de surface, la circulation océanique et comment les masses d'eau dessalées peuvent se propager à la base de la couche de mélange vers l'océan plus profond.

Pour cela, l'utilisation des simulations du modèle CROCO est particulièrement adaptée, car elle permet d'isoler tous les processus qui modifient la salinité dans la couche de mélange, décrits dans l'équation bilan de la salinité ci-dessous :

$$\underbrace{\partial_t \boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{I}:\,taux} = \underbrace{(E-P)\frac{\boldsymbol{S}}{H}}_{\boldsymbol{II}:forçage} \underbrace{\underbrace{-R\frac{\boldsymbol{S}}{H}}_{\boldsymbol{III}} + \underbrace{-\vec{u}.\vec{\nabla}\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{IV}} + \underbrace{\frac{w}{H}\delta\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{V}}}_{advection} - \underbrace{\frac{\partial_t H}{H}\delta\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{VI}:entraînement}$$
$$+ \underbrace{\vec{\boldsymbol{\nabla}}\left(K_h.\vec{\nabla}\boldsymbol{S}\right)}_{\boldsymbol{VII}} + \underbrace{\partial_Z(K_Z.\delta\boldsymbol{S})\frac{1}{H}}_{\boldsymbol{VIII}} \qquad \text{(II.24)}$$

Dans cette équation, S représente la salinité dans la couche de mélange de profondeur H, E-P le terme de forçage atmosphérique constitué de la différence entre l'évaporation et les précipitations, le terme R représentant les décharges de fleuves (définie comme positive hors de l'océan), u le vecteur vitesse horizontal moyenné dans la couche mélangée (ayant des composantes définies comme positives vers l'est et vers le nord), w la vitesse d'entraînement à la base de la couche mélangée, δS le gradient de salinité à la base de la couche de mélange, et K le coefficient de diffusion. Le terme I de l'équation représente la tendance temporelle en

salinité, le terme II le forçage par les précipitations et l'évaporation, le terme III le forçage par les décharges fluviales, IV l'advection horizontale et V l'advection verticale, VI l'entraînement à la base de la couche de mélange, VII le mélange horizontal, VIII le mélange vertical. Dans le cas de CROCO, le forçage par les décharges fluviales est considéré comme un terme d'advection, et les termes III et IV sont indissociés. Dans la suite de l'étude, j'ai observé que les termes de mélange étaient négligeables devant les autres termes, et que les termes d'advection horizontale et verticale se compensaient en grande partie. Ce qui sera appelé terme d'advection dans la suite comprend donc les termes III, IV, et V. Les forçages atmosphériques correspondent au terme II, et l'entraînement est le terme VI.

Tous les termes présentés ci-dessus, à l'exception de l'entraînement, sont calculés à chaque pas de temps du modèle, puis moyennés et archivés tous les jours. L'entraînement est utilisé pour fermer l'équation.

b. Décomposition en climatologies et anomalies interannuelles

Afin d'analyser l'évolution de la salinité dans la couche de mélange en Afrique de l'Ouest, les signaux saisonniers et interannuels moyens sont systématiquement extraits du signal original pour être étudiés séparément. Je présente ici plus en détail le traitement des données appliqué à cette fin.

- Signal saisonnier moyen : Le calcul de la variation saisonnière climatologique se fait en deux étapes. Une première climatologie est calculée en moyennant entre 2010 et 2019 les mesures disponibles chaque jour de l'année. Pour éliminer les fluctuations à court terme, les climatologies sont ensuite soumises à un processus de lissage à l'aide d'un filtre à moyenne glissante de 1 mois.
- Anomalies interannuelles et saisonnières : Pour isoler les variations saisonnières, les moyennes climatologiques ont été soustraites aux séries temporelles d'origine. Une moyenne glissante sur 3 mois a été appliquée pour obtenir la variabilité à l'échelle d'une saison.

c. Estimation de l'effet d'un biais en SST sur l'évaporation : formules de bulk

Dans les différentes simulations CROCO utilisées dans la région de l'Afrique de l'Ouest, j'ai constaté un biais en SSS et en SST. J'ai cherché à voir s'il était possible d'expliquer le biais en SSS observé sur les simulations CROCO par le biais de SST. Les résultats sont présentés dans l'annexe 6 de la publication présentée en section V.3.**Erreur ! Source du renvoi introuvable.**. Pour ce faire j'ai utilisé les formules de bulk, qui permettent des estimations approchées des flux à la surface de l'océan. J'utilise en particulier la formulation de l'évaporation :

$$E = \rho C_q (q_0 - q_z) u \qquad \text{(II.25)}$$

Dans cette formule, E représente l'évaporation, ρ la densité, C_q le coefficient bulk, u la vitesse du vent à l'altitude z au-dessus de la surface. q_z représente l'humidité spécifique à l'altitude z, et q_0 l'humidité spécifique de saturation de l'air à la température de surface θ_0. Une baisse de 2 % sur la valeur de l'humidité spécifique à la surface est appliquée pour prendre en compte la présence de sel dans l'eau de mer.

$$q_z = q_{sat}(d_z, SLP) \qquad \text{(II.26)}$$

$$q_0 = 0.98 q_{sat}(\theta_0, SLP) \qquad \text{(II.27)}$$

En notant SLP la pression de l'air à la surface et e_{sat} la pression partielle de vapeur d'eau, on peut calculer l'humidité spécifique à une température T, définie par la formule suivante :

$$q_{\text{sat}}(T, SLP) = \frac{\epsilon e_{\text{sat}}(T)}{SLP - (1-\epsilon) e_{\text{sat}}(T)} \quad \epsilon = 0.62 \qquad \text{(II.28)}$$

La valeur de e_{sat} peut être reliée à la température par l'équation expérimentale de Goff-Gratch (Goff 1946) :

$$\begin{aligned}&\log_{10}\left(e_{\text{sat}}\left(T\right)\right)=10.79574(1-T_0/T)\\&-5.028\log_{10}\left(T/T_0\right)\\&\mathrm{T}_0=273.16\\&+1.5047510^{-4}\left[1-10^{-82969(T/T_0-1)}\right]\\&+0.4287310^{-3}\left[10^{4.76955(1-T_0/T)}-1\right]\\&+0.78614\end{aligned} \tag{II.29}$$

Dans mon cas j'ai cherché à estimer la différence d'évaporation qui peut être expliquée par une différence de température de surface, en considérant que les autres paramètres intervenant dans les équations précédentes sont indépendants de ce changement de température. En considérant E_i l'évaporation dans une configuration initiale de température, et E_f l'évaporation dans un état final dans lequel on applique un biais de SST, en considérant que seul le terme q dépend de la température dans l'équation (*II.25*), et en supposant toutes choses égales par ailleurs, on peut estimer le changement d'évaporation (et par suite celui de SSS) comme :

$$\frac{\Delta E}{E_i}=\frac{q_{0f}-q_{0i}}{q_{0i}}=\frac{q_{SAT}\left(T_f,SLP\right)-q_{SAT}(T_i,SLP)}{q_{SAT}(T_i,SLP)} \tag{II.30}$$

Les différents termes de cette équation sont calculés à l'aide des formules précédentes. La SLP est estimée à partir de la hauteur dynamique de la surface η simulée par le modèle, en considérant que l'océan est à l'équilibre hydrostatique :

$$SLP=1013-\rho_0 g\eta \tag{II.31}$$

Avec ρ_0 la densité caractéristique de l'eau de mer, et g la constante de gravité.

On peut ensuite introduire cet écart de précipitation dans l'équation de salinité dans le terme lié aux forçages, en considérant en première approximation que les autres termes ne sont pas impactés. On peut ensuite en déduire une différence de tendance en salinité, provoquée par ce biais en SST. J'ai reconstruit ensuite le champ de salinité en ajustant la tendance à chaque pas de temps.

$$\Delta\, \partial_t \boldsymbol{S} = -\frac{\Delta E}{E_i}\, .E_i.\frac{S}{H}\Big| \qquad \text{(II.32)}$$

En utilisant les mêmes notations que dans l'équation (*II.24*).

d. Calcul de la stabilité de la masse d'eau

Lors de l'analyse des variabilités de la salinité dans la couche de mélange en Afrique de l'Ouest, je me suis intéressé à l'effet des flux d'eau douce sur la structure verticale et la stratification de l'océan de surface. J'utilise pour cela comme estimateur la fréquence de Brünt Väisälä :

$$N^2 = -g\frac{1}{\rho_0}\left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right) \qquad \text{(II.33)}$$

où g, ρ et z représentent l'accélération de la gravité $(\mathrm{m/s^2})$, la densité de l'eau $(\mathrm{kg/m^3})$ et la profondeur (m) respectivement. $\rho_0 = 1026\ \mathrm{kg/m^3}$ représente la densité moyenne de référence.

Cette fréquence correspond à la fréquence d'oscillation qu'aurait une masse d'eau écartée de son état d'équilibre pour y revenir. Elle donne donc une indication sur la stratification de la colonne d'eau : plus l'océan est stratifié, plus cette oscillation est rapide. Une valeur positive de N^2 correspond à une colonne d'eau stablement stratifiée. Une valeur négative N^2 indique une stratification déstabilisée tandis que $N^2 = 0$ indique une couche homogène en densité.

III. Prise en compte de la variabilité de la SSS pour l'interprétation des mesures satellitaires actuelles

1) Introduction

Comme on l'a vu dans l'introduction de ce manuscrit, la variabilité de la SSS aux échelles non résolues par les mesures satellitaires contient les structures océaniques sub-mésoéchelles (et à mésoéchelle à haute latitude). Lors des validations des données satellitaires, cette variabilité permet de distinguer la part des différences entre SSS satellitaires et SSS *in situ* due à la différence de résolution spatio-temporelle des données comparées (erreur de représentativité) et la part due aux incertitudes des mesures satellitaires et *in situ*, et permet ainsi de valider plus précisément non seulement les SSS satellitaires mais également leurs incertitudes. Sa connaissance est en outre nécessaire à l'algorithme d'interpolation optimale utilisé pour générer les champs de SSS CCI, comme décrit en section II.1.d.

J'ai caractérisé la variabilité de la salinité aux différentes échelles spatiotemporelles intervenant à la fois dans l'interpolation optimale CCI et dans les erreurs de représentativité à partir de SSS simulées par des modèles océaniques. Ces cartes de variabilité et les analyses des distributions de SSS à l'intérieur des pixels satellitaires sont présentées en section III.2). J'utilise ensuite ces champs de variabilité pour valider les données satellitaires CCI et leurs incertitudes à partir de comparaisons aux mesures Argo. Cette étude a fait l'objet d'une publication et est exposée en section III.3). J'ai testé la robustesse des résultats publiés dans la région du panache de l'Amazone en utilisant une simulation APLUME36 au lieu de la réanalyse GLORYS et étudié une région supplémentaire, la région de l'upwelling du Sénégal Mauritanie à l'aide d'une simulation CROCO (section III.4)). J'ai complété cette étude sur la période satellitaire totale, entre 2010 et 2020, pour plusieurs versions de données CCI (section III.5)).

Dans la suite, l'incertitude liée à la différence d'échantillonnages entre CCI et Argo calculée à partir des champs GLORYS est appelée U_{mis_glo}, son extrapolation à des échelles plus fines (1 km) à l'aide d'une étude spectrale est appelée U_{mis}, et l'incertitude sur les mesures satellitaires est appelée U_{sat}. Plus d'informations sur la définition de ces incertitudes sont disponibles en section II.8).

2) Caractérisation de la variabilité de la SSS à différentes échelles spatio-temporelles

Comme expliqué dans la section Données et méthodes (II.8), j'ai cherché à estimer la variabilité de la salinité à différentes échelles en utilisant les réanalyses GLORYS à 1/12° journalières, sur une période de 3 ans entre 2016 et 2018. J'en ai déduit des cartes de variabilité (l'écart-type des données GLORYS) sous différentes résolutions satellitaires. Afin de mieux connaître la distribution de la SSS à l'intérieur des pixels, j'ai également calculé le skewness et le kurtosis, permettant de mesurer respectivement l'asymétrie et l'aplatissement de la distribution par rapport à une distribution gaussienne.

a. Analyse des écart types

Les écart types de la SSS à différentes échelles, moyennées sur l'année 2016, sont représentés sur la Figure III.1. On observe, comme attendu, des variabilités importantes à toutes les échelles dans les régions de panaches de fleuves, comme les fleuves Congo et l'Amazone, dans les régions de fronts importants comme le Gulf Stream ou bien la rétroflexion du courant des aiguilles, ainsi que dans les régions englacées une partie de l'année, près du Groenland. On observe des variabilités temporelles importantes également engendrées par l'ITCZ dans le Pacifique équatorial. La comparaison de ces différentes cartes, ainsi que leurs histogrammes présentés Figure III.2 montrent que la variabilité de la SSS augmente surtout lorsque l'on passe à une dimension temporelle mensuelle, en particulier dans les régions peu variables : on observe beaucoup moins de valeurs inférieures à 0.1 pss lorsque l'on considère une dimension temporelle de 30 jours par rapport à 1 jour ou 7 jours. Les structures liées aux phénomènes variables mentionnés ci-dessus sont également plus étendues. Il existe cependant plus de valeurs extrêmement fortes, de l'ordre de plusieurs pss, lorsque l'on considère des échelles temporelles réduites, explicables par de variations fortes et rapides de la SSS et un plus faible nombre de mesures utilisées.

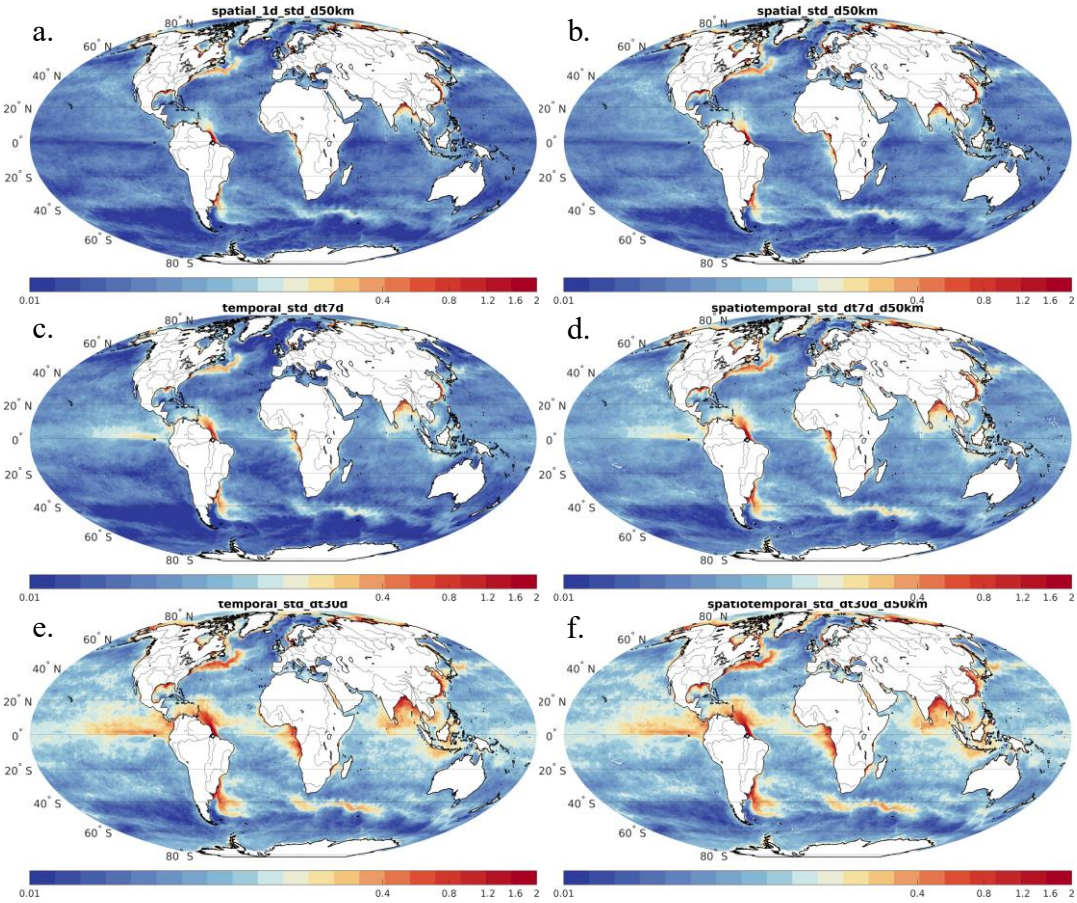


Figure III.1 : Champs de variabilité de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles, en pss : a. variabilité à une dimension (voir Figure II.26 pour une définition), b. dans 50 km 1 jour, c. ponctuelle sur 7 jours, d. dans 50 km sur 7 jours, e. ponctuelle sur 30 jours, f. sur 50 km et 30 jours.

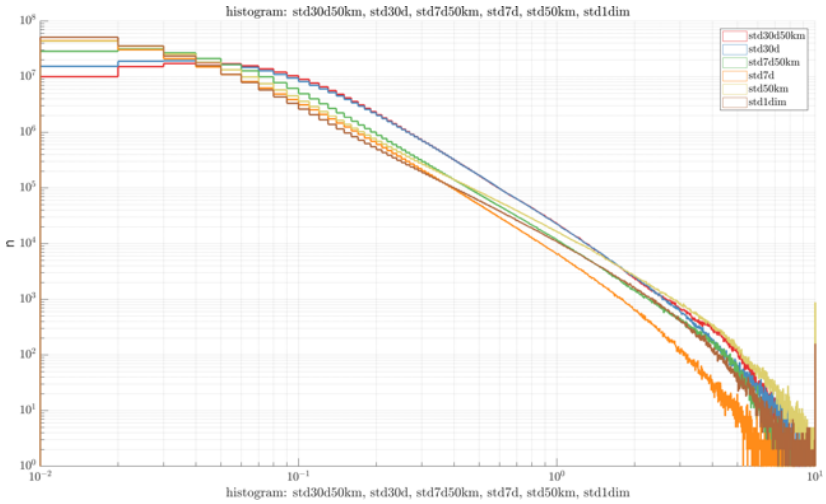


Figure III.2 : Histogramme des variabilités de la SSS calculées sous différentes échelles spatiotemporelles décrites Figure III.1, en pss. Les axes sont en échelle logarithmiques pour clarifier la lecture.

Comparer ces champs de variabilité à différentes échelles permet de déterminer laquelle des dimensions spatiale ou temporelle est génératrice de plus de variabilité. À l'échelle

spatiotemporelle intermédiaire de 7 jours 50 km, la dimension spatiale joue le rôle le plus important, les champs de variabilité dans 7 jours 50 km sont en effet très similaires aux champs de variabilité dans 1 jour 50 km, on calcule une corrélation carrée r^2=0.9 entre les deux et un apport moyen de 5 % lorsque l'on ajoute la dimension temporelle (Figure III.3a). A l'inverse, en considérant la dimension spatiotemporelle de 30 jours et 50 km, on constate que c'est la variabilité temporelle qui est la plus importante. On obtient également un r^2=0.9, la dimension spatiale ajoutant en moyenne 10 % à la variabilité temporelle sur 30 jours (Figure III.3b).

On peut enfin noter une forte corrélation (r^2=0.85) entre la variabilité de la SSS calculée sur une dimension (le long d'un transect traversant le pixel, comme par le TSG d'un bateau) et la variabilité calculée sur une surface de 50 km de diamètre, l'écart type sur une dimension valant en moyenne 0.7 fois l'écart type sur deux dimensions (Figure III.3c). Ce rapport de 0.7 en moyenne est en accord avec la valeur théorique. Callies and Ferrari (2013) indique le lien entre un spectre bi-dimensionnel et un spectre de mesures en une dimension dans la même région. Ce lien peut être approximé par :

$$\mathcal{S}_k \approx \frac{2}{\pi}\int_k^{\infty} \frac{Ak_h^{-n}}{(k_h^2 - k^2)^{1/2}}\, dk_h = A'k^{-n} \text{ avec}$$
$$A' = \frac{2}{\pi} A \int_1^{\infty} \frac{\kappa^{-n}}{(\kappa^2 - 1)^{1/2}}\, d\kappa. \qquad \text{(III.1)}$$

Avec $\mathcal{S}_k$ le spectre en une dimension, Ak_h^{-n} le spectre en deux dimensions de pente n.
Le rapport entre les deux variabilités vaut donc, avec n la pente du spectre :

$$\frac{2}{\pi}\int_1^{\infty} \frac{\kappa^{-n}}{\sqrt{\kappa^2 - 1}}\, dx = \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)} \qquad \text{(III.2)}$$

Ce rapport varie entre 0.7 pour une pente de spectre de 5/3 à 0.5 pour une pente de 3.

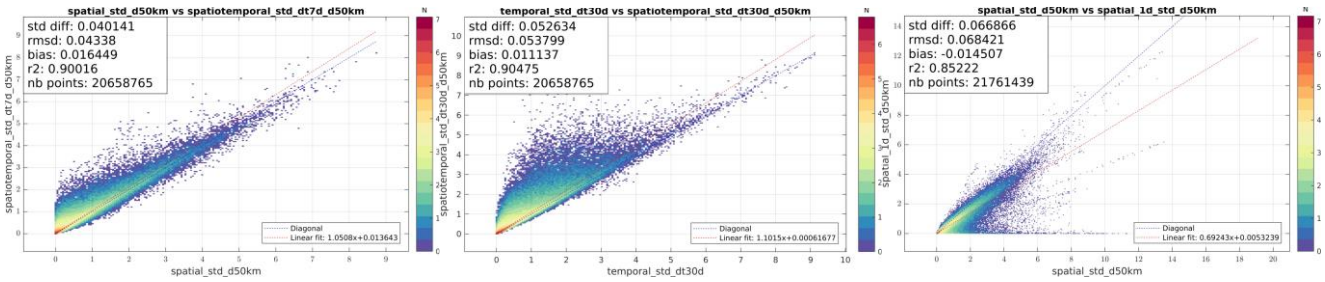


Figure III.3: Nuages de points comparant les variabilités de la SSS GLORYS sous différentes échelles, seuls les scatterplot montrant de bonnes corrélations ont été montrées (r2> 0.85). Les échelles colorées sont logarithmiques, elles représentent le nombre de points en puissance de 10. Gauche : 50 km 7 jours versus 50 km 1 jour, Milieu : 50 km 30 jours versus ponctuelle 30 jours, Droite : une dimension sur 50 km versus deux dimensions sur 50 km. Les abscicces et ordonnées sont données en pss.

Il existe un cycle saisonnier de ces variabilités de salinité, principalement liés à deux évènements : l'étalement du panache de l'Amazone dans l'Atlantique tropical, qui s'étend jusque 20°N en automne, et la fonte de la glace en arctique On peut observer cela sur le Hovmöller de la Figure III.4, ainsi que sur les cartes saisonnières présentées en annexe 1.

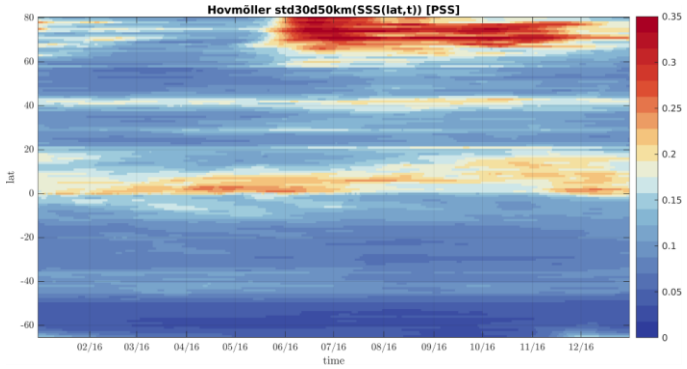


Figure III.4 : Hovmöller de la variabilité de la SSS GLORYS sous 50 km 30 jours sur l'année 2016, en pss.

b. Analyse des distributions

Bingham et al. (2002) ont montré, à l'échelle globale à partir de données *in situ*, que la distribution de la SSS dans des boîtes de 1° n'était pas gaussienne mais asymétrique, avec beaucoup de valeurs faibles de SSS liées soit à des apports d'eau douce, soit à la présence de fronts importants. J'ai cherché à poursuivre cette étude en caractérisant les distributions de SSS à fine échelle à l'aide des données GLORYS.

Les valeurs de kurtosis et de skewness pour chacune des dimensions spatiotemporelles, ainsi que leurs histogrammes, et que l'estimateur de l'anisotropie (défini en section II.8) des échantillons de SSS sont disponibles en annexe 1. On observe que le kurtosis des échantillons de SSS est en général inférieur à celui d'une gaussienne (égal à 3), indiquant donc une

distribution plus piquée. Cette valeur tend à augmenter lorsqu'on élargit l'échelle spatiotemporelle, et elle est en particulier nettement plus forte lorsqu'on considère une dimension spatiale de 50 km au lieu d'un point. Des valeurs fortes de kurtosis, supérieures à la valeur attribuée à une gaussienne, sont observées au niveau des fronts marqués de salinité.
Les valeurs de skewness sont proches de 0 lorsqu'on considère des échelles réduites, indiquant donc des distributions centrées. Plus on élargit les échelles spatiotemporelles considérées, plus on observe de valeurs fortement positives ou négatives de skewness, indiquant respectivement un décentrage de la distribution vers la droite ou vers la gauche par rapport à une distribution gaussienne.
Le champ d'anisotropie est également corrélé à la variabilité de la SSS, suggérant que l'isotropie des distributions est dépendante de la présence ou non de fronts. On observe que la salinité est plus variable sur l'axe Est-Ouest que sur l'axe Nord-Sud dans la région tropicale.

Les distributions de SSS à l'intérieur des pixels satellitaires ne sont donc pas systématiquement gaussiennes. Dans les cas où la SSS est très stable, la distribution est plus piquée et a des queues de distributions moins longues qu'une gaussienne, et dans les cas de forte variabilité de la SSS à l'intérieur d'un pixel, la distribution peut être décentrée vers la gauche ou vers la droite par rapport à la moyenne, indiquant des queues de distribution non symétriques. Enfin, les échantillons de SSS pris dans des pixels de 50 km ne sont pas toujours isotropes, en particulier dans les tropiques ou dans les zones présentant des fronts de SSS importants.

Les champs d'erreur de représentativité présentés Figure III.1, ainsi que des champs équivalents calculés entre 150 km et 50 km pour prendre en compte la résolution des mesures Aquarius, ont été introduites dans l'analyse objective permettant de générer les champs CCI (section II.1.d), comme décrit dans une publication à laquelle j'ai participé (Boutin et al. 2021). Par ailleurs, des distributions non gaussiennes, plus piquées, ont été introduites au CATDS pour générer des cartes de SSS à haute résolution temporelle (J. Boutin 2022). J'ai également participé à l'élaboration de ces cartes. Connaissant ces valeurs de variabilité de la SSS dans les pixels satellites, je me suis intéressé dans la section suivante à leur impact sur l'estimation des incertitudes des SSS satellitaires à partir de comparaisons entre données *in situ* et satellitaires. En effet cette variabilité, comme expliqué dans la section II.8.c, permet de quantifier les erreurs attendues liées à la différence d'échantillonnage entre les données moyennées des satellites et les données ponctuelles *in situ*, lors des validations.

3) Publication : le rôle de l'incertitude liée à l'erreur d'échantillonnage pour les validations des données satellitaires à partir de comparaisons à des données *in situ*

J'ai établi l'incertitude sur les champs satellitaires CCI en prenant en compte la variabilité de la SSS et les effets de sous-échantillonnages à différentes échelles spatio-temporelles. Cela m'a permis non seulement de valider de façon plus précise la SSS CCI mais également leurs incertitudes. Les champs de SSS CCI générés à partir des mesures satellitaires SMOS, Aquarius et SMAP sont intégrés sur des échelles de 50 km et une semaine ou un mois. Leur validation se base en général sur des comparaisons à des SSS *in situ*, mais une part des différences provient de la différence de résolution spatio-temporelle des données comparées. A partir des réanalyses GLORYS, j'ai estimé les erreurs de représentativité correspondantes (voir section précedente), et montré qu'elles permettent de réconcilier les incertitudes estimées lors de la génération des champs SSS CCI par l'analyse objective (par propagation du bruit intrinsèque aux mesures satellitaires et aux paramètres auxiliaires utilisés dans l'inversion des SSS) et les incertitudes obtenues par comparaison à des mesures *in situ* (Figure III.5). A l'échelle globale, les erreurs de représentativité expliquent 33 % (15 %) de l'écart (std différence) entre les SSS satellitaires mensuelles (hebdomadaires) et les SSS ponctuelles Argo. Une fois cet effet pris en compte, l'incertitude sur les SSS CCI satellitaire est estimée à 0.10 pour les champs mensuels, 0.14 pour les champs hebdomadaires.

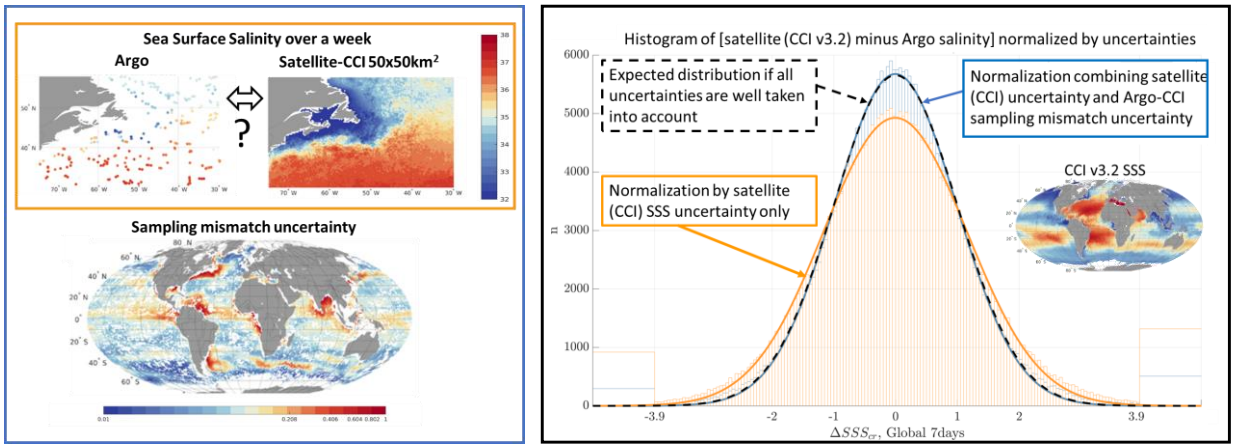


Figure III.5 : résumé graphique de la publication : gauche : comparaison des échantillonnages in situ et satellitaires, et incertitudes qui en découlent (bas). Droite : distribution des différences réduites par les incertitudes, avec ou sans l'incertitude liée à l'échantillonnage.

remote sensing

MDPI

Article

Satellite and In Situ Sampling Mismatches: Consequences for the Estimation of Satellite Sea Surface Salinity Uncertainties

Clovis Thouvenin-Masson [1,2,3,*], Jacqueline Boutin [1], Jean-Luc Vergely [2], Gilles Reverdin [1], Adrien C. H. Martin [4], Sébastien Guimbard [5], Nicolas Reul [6], Roberto Sabia [7], Rafael Catany [8] and Odile Hembise Fanton-d'Andon [2]

1 LOCEAN/IPSL Laboratory, Sorbonne University, SU-CNRS–IRD–MNHN, 75005 Paris, France; jacqueline.boutin@locean.ipsl.fr (J.B.); gilles.reverdin@locean.ipsl.fr (G.R.)
2 ACRI-st, 06904 Sophia-Antipolis, France; jean-luc.vergely@acri-st.fr (J.-L.V.); oha@acri-st.fr (O.H.F.-d.)
3 CNES (Centre National des Études Spatiales), 31401 Toulouse, France
4 National Oceanography Centre, Southampton SO14 3ZH, UK; admartin@noc.ac.uk
5 Ocean Scope, 29200 Brest, France; sebastien.guimbard@ocean-scope.com
6 IFREMER (Institut Français de Recherche Pour l'Exploitation de la Mer), 29280 Plouzané, France; nicolas.reul@ifremer.fr
7 Telespazio-UK for ESA, ESRIN, 00044 Frascati, Italy; roberto.sabia@esa.int
8 ARGANS Ltd., Plymouth PL6 8BU, UK; rcatany@argans.co.uk
* Correspondence: clovis.thouvenin-masson@locean.ipsl.fr

check for updates

Citation: Thouvenin-Masson, C.; Boutin, J.; Vergely, J.-L.; Reverdin, G.; Martin, A.C.H.; Guimbard, S.; Reul, N.; Sabia, R.; Catany, R.; Hembise Fanton-d'Andon, O. Satellite and In Situ Sampling Mismatches: Consequences for the Estimation of Satellite Sea Surface Salinity Uncertainties. *Remote Sens.* **2022**, *14*, 1878. https://doi.org/10.3390/rs14081878

Academic Editors: Philippe Waldteufel, Yann H. Kerr and Christine Gommenginger

Received: 14 February 2022
Accepted: 28 March 2022
Published: 13 April 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Abstract: Validation of satellite sea surface salinity (SSS) products is typically based on comparisons with in-situ measurements at a few meters' depth, which are mostly done at a single location and time. The difference in term of spatio-temporal resolution between the in-situ near-surface salinity and the two-dimensional satellite SSS results in a sampling mismatch uncertainty. The Climate Change Initiative (CCI) project has merged SSS from three satellite missions. Using an optimal interpolation, weekly and monthly SSS and their uncertainties are estimated at a 50 km spatial resolution over the global ocean. Over the 2016–2018 period, the mean uncertainty on weekly CCI SSS is 0.13, whereas the standard deviation of weekly CCI minus in-situ Argo salinities is 0.24. Using SSS from a high-resolution model reanalysis, we estimate the expected uncertainty due to the CCI versus Argo sampling mismatch. Most of the largest spatial variability of the satellite minus Argo salinity is observed in regions with large estimated sampling mismatch. A quantitative validation is performed by considering the statistical distribution of the CCI minus Argo salinity normalized by the sampling and retrieval uncertainties. This quantity should follow a Gaussian distribution with a standard deviation of 1, if all uncertainty contributions are properly taken into account. We find that (1) the observed differences between Argo and CCI data in dynamical regions (river plumes, fronts) are mainly due to the sampling mismatch; (2) overall, the uncertainties are well estimated in CCI version 3, much improved compared to CCI version 2. There are a few dynamical regions where discrepancies remain and where the satellite SSS, their associated uncertainties and the sampling mismatch estimates should be further validated.

Keywords: sea surface salinity; sampling mismatch; sub footprint variability; uncertainty; validation

1. Introduction

Knowledge of salinity is crucial for understanding the thermohaline circulation of the ocean as salinity makes a large contribution to water density. As an advected property, it is an interesting tracer of oceanic phenomena. Salinity also conditions the stratification of the surface layer and thus influences the ability of the ocean surface to mix [1]. Salinity is a key indicator for monitoring the water cycle as it integrates the freshwater input to the ocean, through interactions with the atmosphere (precipitation and evaporation), with the continents (river discharges) or with ice [2].

Sea Surface Salinity (SSS) has been measured by satellite for more than 12 years, thanks to three satellite missions: the Soil Moisture and Ocean Salinity (SMOS), the first SSS observing satellite mission launched in 2009 and still operating today; the Aquarius mission, which operated from 2011 to 2015; and the Soil Moisture Active Passive (SMAP) mission launched in 2015 and still operating today. These three satellite missions measure brightness temperature at 1.4 GHz, allowing for the retrieval of SSS, with unprecedented spatio-temporal coverage (see reviews in [3,4]). Although they operate in the same frequency band, they have their own characteristics in terms of spatial resolution: the spatial resolution of SMOS and SMAP-retrieved SSS (~40 to 50 km) is about a factor 2 to 3 higher than that of the Aquarius SSS (see more details in [3]).

The recent ESA Climate Change Initiative project (CCI+SSS) combines measurements of these three satellite missions, resulting in a decrease of the differences between satellite salinity fields and Argo float surface salinities (standard deviation (robust standard deviation) of the monthly CCI SSS minus the Argo float surface salinities over the whole period equal to 0.27 (0.16) globally) [5,6]. However, the interpretation of such comparisons in terms of satellite field uncertainties is tricky as it involves not only uncertainties in satellite estimates but also uncertainties in in-situ estimates and sampling mismatches [7]. In this paper, we focus on better understanding these differences by estimating the contribution of the sampling mismatch between in-situ salinity and the CCI+SSS fields as produced with the last CCI+SSS version (version 3).

Satellite SSS is typically compared to in-situ measurements for validation. The in-situ data used are of several types: either at fixed point (moorings) or from moving platforms (ships; floats). A major problem with these comparisons is the difference in sampling between satellite and in-situ datasets [8]: satellite data are integrated over a surface, of nearly 50 km in diameter for the CCI products, and are either for a single time or over a weekly or monthly period, in the case a temporal optimal interpolation is applied, as is done for the CCI fields. In-situ data are generally at a single point in space and time, as is the case for ships, Argo floats and mooring measurements. Moreover, satellite salinity represents the upper 1 cm depth, whereas in situ salinity is mostly measured at a few meters' depth.

This difference in sampling necessarily implies a different sensitivity of both types of measurements to small-scale variability and distorts the uncertainty estimate of the satellite data if the in-situ data is used as a reference without taking into account the uncertainty due to the sampling mismatch. This issue is particularly important in regions of high SSS variability such as river plumes (e.g., Amazon plume), meanders of large currents (e.g., Gulf Stream) or rainy regions, as illustrated on Figure 1. The variability of salinity is of three kinds: spatial, temporal and vertical [8]. We mainly focus on spatial and temporal variability in this paper.

Thus, to get a valid estimate of the uncertainties of satellite products obtained by comparison with in-situ data, it is important to complement the satellite SSS uncertainty with the uncertainty due to the sampling mismatch [7]. In case of satellite salinities, Vinogradova et al. [9] found that, in several ocean regions, including the tropics and western boundary current regions, small-scale variability, simulated with a 1/12° HYCOM model, is an important source of sampling mismatch in comparisons between 1° (~Aquarius footprint) satellite SSS and in situ salinities. More recent studies (see [10]) used in situ measurements and high-resolution models (1/48°) to estimate the sub-footprint variability (SFV) at level 2 and simulate spatial integration for Aquarius at footprint size of 100 km and for SMAP at 40 km. Strong dependencies of SFV on region, season and footprint size have been found. SFV is particularly high in rainy regions [11], along the continental shelves where strong river outflow is present [12], and near frontal zones such as the western boundary currents [13]. The variabilities obtained range from less than 0.1 to 1 pss. To simulate expected RMS between satellite and Argo salinities, Bingham et al. [13] derives Representation Errors (RE) between a footprint integrated satellite SSS and a local SSS using one year of high-resolution simulations; Bingham et al. [13] reports that the distribution

of RE for a 40 km footprint peaks at 0.06 pss, with typical values of 0.01–0.15 pss but also some high values reaching 0.4 pss or even larger (see Figure 9b in [13]).

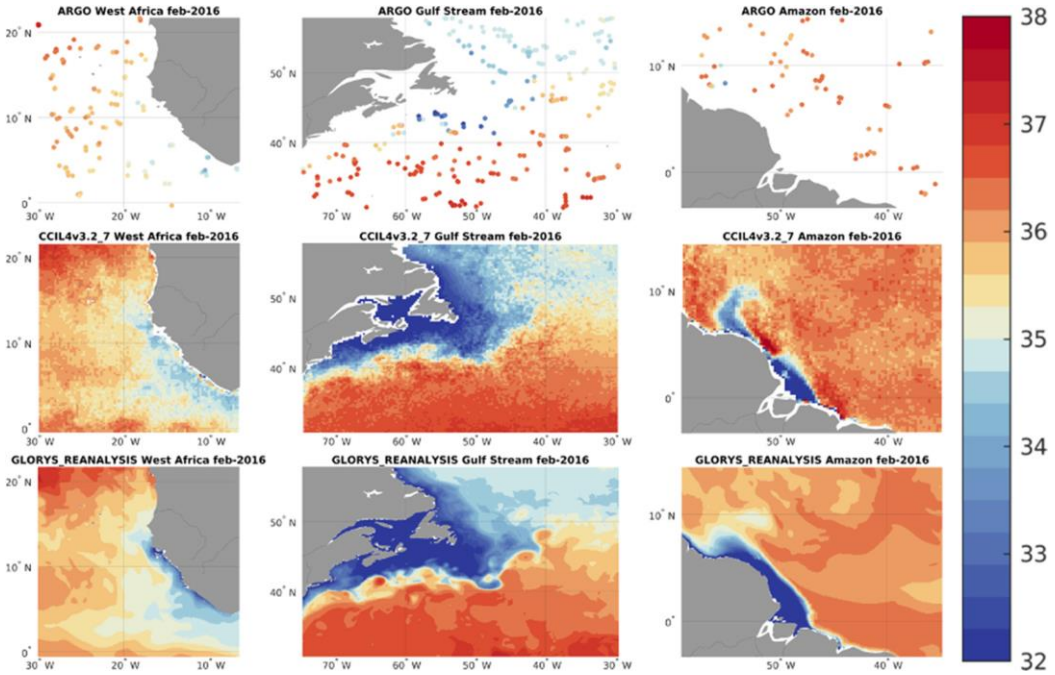


Figure 1. Examples of SSS measured in three regions, in February 2016. **Top**: ARGO floats, **Middle**: CCI, **Bottom**: GLORYS Reanalysis; Column 1: West African coast; Column 2: Gulf Stream; and Column 3: Amazon plume.

The objective of this paper is, for the first time, to demonstrate the applicability of using uncertainties related to sampling mismatch, to validate satellite SSS and its uncertainties. Indeed, until now, the uncertainty related to sampling mismatch has been neglected in satellite SSS validations, and the satellite SSS uncertainties provided by satellite retrieval systems are very rarely evaluated. This demonstration study is used to interpret the differences observed between the weekly (monthly) satellite CCI+SSS fields and Argo salinities, given the uncertainties attributed to the CCI+SSS fields and the sampling mismatches between both types of measurements. We will then focus on validating the CCI+SSS and associated uncertainties. The sampling mismatch uncertainty is estimated using SSS simulated with a 1/12° resolution model, and small-scale variability not resolved by the model will be estimated following a spectral method similar to that proposed by [12]. We conduct our study using three years (2016–2018) of SSS simulation contemporary to CCI+SSS fields. We consider both the spatial variability within a satellite footprint and the temporal variability within one week (month).

We report results obtained with the weekly products in the main paper; results obtained with the monthly products are reported in the Supplementary Material. A similar study was conducted on CCI v2 in order to compare the two versions, and the results obtained with CCI v2 are also in Supplementary Materials.

The datasets and methods are described in Section 2. Results are presented in Section 3, followed by a discussion (Section 4) and conclusions (Section 5).

2. Materials and Methods

2.1. Materials

The study is performed from 2016 to 2018, a period during which SMOS and SMAP data are available, and focuses on the interpretation of the comparisons between CCI+SSS and Argo salinities. We use three data sources:

- Satellite product: CCI v3.2.

We use version 3.2 of the SSS products generated in the framework of the ESA CCI project [14]. They have been generated following a methodology very similar to the one described in [5] with main modifications described in [15,16]. They are summarized below.

These Level 4 (L4) SSS products are derived using a temporal optimal interpolation of SSS retrieved from the three L-band radiometric satellite missions launched since 2010: SMOS (2010–present), SMAP (2015–present), and Aquarius (2012–2015). The SSS fields span a period from 2010 to 2020 and are available on a 25 km Equal-Area Scalable Earth (EASE 2) Grid [17] and at weekly and monthly temporal resolutions. During the period studied here (2016–2018), both SMOS and SMAP data are available.

The CCI v3.2 SSS fields have been generated following an optimal interpolation similar to CCI v2 [5]. Compared to the CCI v2 processing, the CCI v3 processing has been updated to improve the long-term stability of the SMOS SSS entering in the CCI L4 optimal interpolation and to improve the L4 SSS uncertainty estimates. In particular:

- Instead of using SMOS SSS produced by the Centre Aval de Traitement des Données SMOS (CATDS) operational chain, the SMOS SSS were reprocessed with a modified ESA v662 processor [15].
- Instead of using European Center for Medium Weather Forecast (ECMWF) Integrated Forecast System (IFS) fields as auxiliary parameters, the processing used ECMWF ERA5 fields.
- The SMOS vicarious calibration, the so-called Ocean Target Transformation, is estimated using in situ interpolated SSS fields produced by the In Situ Analysis System (ISAS) [18] instead of using a salinity climatology.
- The dielectric constant model is updated as proposed by [5].
- The SMOS SSS affected by instantaneous rain rate are adjusted for RR up to 10 mm h^{-1} [19] and are sorted out in case of stronger RR. SMAP SSS retrieved with RR larger than 0.5 mm h^{-1} are filtered out. Therefore, in rainy regions the CCI v3 fields are close to bulk salinities.
- In the CCI v3 L4 optimal interpolation, a full least square propagation of the errors is implemented, instead of a simplified propagation.
- Representativity uncertainties between the swath measurements of the SMOS and SMAP level 2 SSS and that of the L4 estimated SSS (weekly or monthly fields), corresponding to the temporal variability of the SSS at the SMOS and SMAP resolution (~50 km), within one week or one month, are taken into account as described in [5] and in its Supplementary Information (S3). The equations are the same for CCI version 2 and version 3, but the numerical implementation differs: a full error propagation scheme has been implemented in version 3.

The original footprint sizes of level 2 SMOS and SMAP SSS entering in the CCI v3.2 processing are slightly less than 50 km (close to 45 km for SMOS (depending on the across swath location) and to 43 km for SMAP). SMOS original SSS are provided on an icosahedral Snyder equal area (ISEA) grid at 12 km resolution. SMAP original SSS are on a regular 0.25° grid. In a first CCI+SSS processing step, SMOS and SMAP SSS are reprojected on the 25 km EASE 2 grid using nearest neighbors method. In the later stages of the CCI+SSS processing, no spatial smoothing is applied, with each grid point being treated independently. Based on that, we consider in the following that each grid point is representative of SSS obtained with a simple average within 50 km grid cell. In order not to add too much complexity to the processing and the computing time, we consider that the

weekly and monthly temporal OI is equivalent to a simple average of SSS over one week and one month.

- In-situ products: Argo floats

The Argo [20] project is a set of ~3000 floats moving in the upper 2000 m of the global ocean. These floats give access to about 100,000 measurements of salinity and temperature per year with a global coverage, and an average spacing of 3° between measurements. These data are collected and made freely available by the international Argo project and the national programs that contribute to it.

We use the collocations provided by the SMOS Pilot-Mission Exploitation Platform (Pi-MEP) [21] between the CCI fields and Argo floats. The colocation methodology will be described in Section 2.2.

The Pi-MEP collocations are made from Argo data with a quality index of 1 or 2. Argo upper measurements between 10 m depth and 0 m depth are considered as surface data and are used as a comparison to satellite data. Most of the Argo data resulting from this selection are taken at a depth of about 5 m. More details about this method are available in the Pi-MEP reports.

- Mercator GLORYS reanalysis

We use the daily high-resolution (1/12°) Mercator GLORYS reanalyzed SSS. We consider that it resolves variability above the Nyquist wavelength (1/6°). These SSS simulated fields have a slightly reduced spatial resolution compared to studies [12,13] to allow global ocean coverage, while keeping the small scales that contribute much to SSS variability in a satellite pixel [22].

The GLORYS12V1 product is a CMEMS global ocean eddy-resolving (50 vertical levels) reanalysis. These data are available from 1993 to today. These reanalyses are based on the NEMO ocean model, forced, at the surface by ECMWF ERA5 data, and by climatological runoffs. Satellite sea level anomalies, SST, sea ice concentration, in-situ temperature and salinity vertical profiles (but not satellite SSS) are assimilated using a reduced-order Kalman filter derived from a singular evolutive extended Kalman (SEEK) filter with a three-dimensional multivariate background error covariance matrix and a 7 day assimilation cycle [23].

Data are available at daily temporal resolution, and on a regular 1/12° grid, for 50 levels, starting from the sea surface with levels at 0.5 m, 1.5 m, 2.6 m, 3.8 m and 5 m. We use the level at 5 m depth as a proxy for Argo upper salinity. See [24] for a complete description of the model.

An example of the estimation of GLORYS SSS variability within satellite grid cells (the calculation method is described in Section 2.2) is shown on Figure 2. This map shows the standard deviation of the GLORYS salinities accumulated in boxes of 50 km × 50 km and during a 7-day period, corresponding to the spatiotemporal resolution of the weekly CCI data for the day of 15 February 2017. This estimation has been computed for every day over the entire period from 2016 to the end of 2018. As described in the methods section, this represents the variability of salinity at 5 m depth. The same maps were generated with surface salinities for a better understanding of the vertical variability of near-surface salinity (see discussion below). As expected from previous studies [12,25], high standard deviation values are observed in areas of high natural variability, such as river plumes (e.g., Amazon, Congo) and regions with strong salinity gradients (e.g., Gulf Stream). The 30-day variability is similar to the 7-day variability with stronger values (the map is available in the Supplementary Materials).

Table 1. Definition of regions shown on Figure 2.

Region	Latitude (°)		Longitude (°)		Very Variable Area
Gulf Stream	30.52	57.64	−74.83	−29.70	X
Amazon plume	−3.43	14.37	−59.27	−34.89	X
Agulhas return current	−54.84	−31.43	5.84	91.43	X
South Pacific Ocean	−60.27	−40.10	−172.35	−81.57	

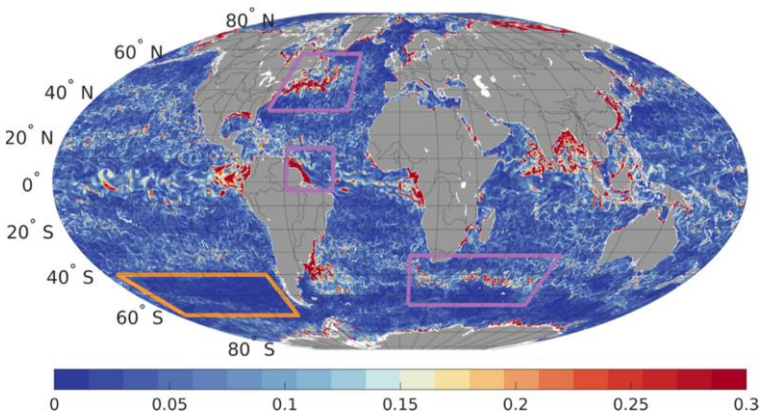


Figure 2. Standard deviation of GLORYS data within one week and 50 × 50 km^2 surface (U_{mis_glo}) at 5 m depth for the 15 February 2017. Orange (purple) boxes correspond to the low (high) variability regions that are selected for our tests (see regions definition in Table 1).

2.2. Methods

- Uncertainties balance

We follow the methodology proposed by [7] to validate the uncertainties of the satellite products, by considering the total uncertainty composed of three terms:

U_{sat} is the uncertainty of each satellite estimate.

U_{mis} is the uncertainty due to sampling mismatch between satellite data and in-situ data.

U_{ref} corresponds to the uncertainties of the reference in-situ data.

According to [7], uncertainties of satellite measurements are well represented when the observed differences between satellite and reference in-situ measurements, normalized by the quadratic sum of these uncertainties, follow a Gaussian distribution with a standard deviation of 1.

$$\mathrm{STD}\left(\frac{x_{sat} - x_{ref}}{\sqrt{{U_{sat}}^2 + {U_{mis}}^2 + {U_{ref}}^2}}\right) = 1 \quad (1)$$

In Equation (1), STD stands for the standard deviation, x_{sat} represents the satellite measurements and x_{ref} represents the reference in-situ data. We now detail how the various terms of Equation (1) are obtained.

- $x_{sat} - x_{ref}$

The colocations between CCI+SSS and Argo floats measurements are performed by the Pi-MEP, as described in [5,21], and summarized below.

CCI products are sampled on a Rsat spatial grid (corresponding to the 25 km EASE grid) and with RT time sampling: RT is one day for weekly products and 15 days for monthly products. Given CCI products centered at T0, each Argo data sampled within [T0−RT/2 T0+RT/2] is colocated with the CCI SSS at grid nodes located within a radius of Rsat/2 from the Argo data location. If several CCI SSS product samples are found to meet these criteria, the final CCI SSS match-up point is chosen to be the CCI SSS with central time, which is the closest in

time to the in situ data measurement date. Hence, there is a unique matchup corresponding to each Argo measurement.

The locations of x_{ref} corresponding to the Argo measurement points made available in the Pi-MEP database are used as the basis for calculating the normalized differences described in Equation (1). The terms U_{sat} and U_{mis} are thus collocated at these locations as described below.

- U_{sat}

The uncertainty of each CCI+SSS gridpoint is estimated in the course of the CCI+SSS temporal OI using the formalism described in the Supplementary Information (S3) of [5]. It takes into account uncertainties of SMOS and SMAP individual SSS, their representativity uncertainties with respect to a weekly (or monthly) integrated field, and uncertainties on the bias corrected by the CCI processing. In the CCI+SSS v3 processing, while the formalism remains the same as the one of version 2, the numerical implementation differs: a full least square propagation of the uncertainties is implemented, instead of a simplified propagation involving matrix inversion over limited time period as in version 2. This quantity is described in Figure 3b.

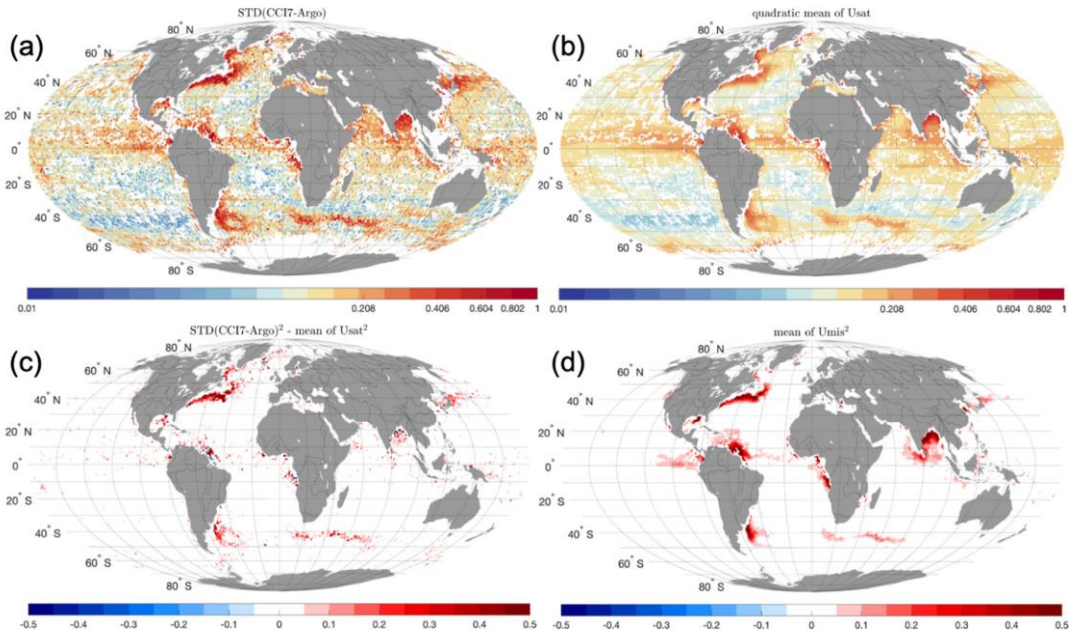


Figure 3. Terms of Equation (1) integrated for 2016–2018: (**a**) observed STD of the differences between weekly CCI and Argo salinity; (**b**) quadratic mean of U_{sat}; (**c**) the difference of squared terms shown in (**a**,**b**), STD^2 (CCI7-Argo)—mean ($U_{sat}{}^2$); and (**d**) quadratic mean of U_{mis}. The statistics are reported in 1° boxes containing at least 3 Argo measurements (boxes in Figure 3a,b with less than 3 measurements are in white).

- U_{ref}

In our case, U_{ref} corresponds to the uncertainty of the Argo salinity. As we only use Argo data with a quality index of 1 or 2, these uncertainties are small, in the order of 0.01 or less [26]. They are expected to be much smaller than the other uncertainties in Equation (1) and are neglected in the following.

- U_{mis}

To estimate the uncertainties due to sampling mismatch, we first compute the variability of SSS from Mercator GLORYS reanalysis at a resolution of 1/12° (U_{mis_glo}).

We approximate the sampling mismatch as the standard deviation of GLORYS SSS within a radius of R km (R = 25 km) and a temporal range of dt/2, corresponding to the spatio-temporal integration of CCI products of 50 km and of 3.5 days for weekly fields and 15 days for monthly fields. Since the Pi-MEP matchups consider only the closest matchups, this sub-pixel variability slightly overestimates the variability. We performed tests considering various spatio-temporal R, and dt radii, and we concluded that the overestimate is less than 5%, with the major effect arising from the spatio-temporal smoothing of the CCI products relatively to non-averaged SSS; the spatio-temporal distance between the center of the CCI product and the individual in-situ measurements is a second order effect.

As our study focuses on the comparison between in-situ data taken at 5 m depth, we compute the standard deviation of the GLORYS model data at 5 m depth. CCI+SSS v3.21 fields are adjusted from the instantaneous rain effect, based on earlier comparisons between SMOS SSS in rainy conditions and Argo salinities [19], hence reducing the difference expected between satellite SSS in the upper 1cm depth and the Argo salinity at ~5 m depth.

We calculate the sampling mismatch for each day over three years (2016–2018).

The above estimate of U_{mis_glo} is limited, however, by the resolution of the GLORYS reanalysis (1/12°). This means that the variability at scales smaller than 1/6° present in the point measurements will not be well represented in GLORYS simulations. We take this limitation into account by estimating the variability missed by the GLORYS reanalysis following a wavenumber spectral analysis [12], as summarized below and described with more details in Appendix A.

The variance of a signal between a chosen wavelength and the Nyquist wavelength can be inferred assuming that the slope of the spectrum between the two wavelengths is reasonably known. This variance is given by the following formula, which follows from the integration of the power spectral density (PSD):

$$\sigma_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi b}{m-2}(\lambda^{m-2} - {\lambda_n}^{m-2})} \tag{2}$$

where m corresponds to the slope of the PSD when viewed as a log-log plot, b is the y-intercept of the PSD, λ is the wavelength below which we calculate the variance and λ_n is the Nyquist wavelength.

What we want to estimate is the influence of a change in Nyquist wavelength on the variance of salinity below a wavenumber of 50 km. We therefore calculate σ_{50} for $\lambda_n = 20$ km, which corresponds to the STD actually measured by GLORYS, and σ_{50} for $\lambda_n = 0$ km, which corresponds to a perfect case where all the signal power is considered.

Spectral studies in the Arabian Sea and in the western Pacific [12], as well as in the tropical and subtropical Atlantic Ocean [22], suggest that at the scale of interest, for a wavelength below 50 km, the salinity PSD has a slope close to m = 3.3. This is quite close to a k^{-3} power law expected for a passive tracer under the influence of advection, with the slightly steeper slope being likely attributable to atmospheric processes [12]. Even though this slope is likely to vary slightly from time to time and place to place, we use it to infer an order of magnitude of the ratio between the variability expected in the case where all wavelengths below 50 km are considered, U_{mis}, and the variability estimated with GLORYS reanalysis resolution, U_{mis_glo}, using Equation (2). We find the following relation:

$$U_{mis} = 1.1985 U_{mis_glo} \tag{3}$$

The results are given thereafter with and without this adjustment.

We evaluate the Gaussian shape of the normalized differences distributions Equation (1) following two methods:

- When considering large regions (global ocean or in boxes represented on Figure 2 and defined in Table 1), we approximate the statistical distributions of the normalized differences with a Gaussian fit and we compare the fitted STD with the expected value of 1.
- In order to make local analysis, we also compute STD of normalized differences in 2° boxes. However, due to the reduced number of colocations in 2° boxes (as will be seen in Section 3.2.2), they are noisy and it is not possible to estimate a reliable fit of the normalized differences distribution in each box. Nevertheless, we look at to which extent the statistical distribution of STD estimated in 2° boxes is consistent with Gaussian distributions of the normalized differences in each box. This is performed by considering the histograms of the variances, STD^2, multiplied by the number of measurements. Indeed, given $X_1, \cdots, X_n$ a random sample from a Gaussian distribution (with a μ average and a σ standard deviation) $N(\mu,\sigma^2)$, in any of the 2° boxes, with $S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_1^n \left(X_i - \overline{X}\right)$, the random variable $Y = (n-1)S^2/\sigma^2 = n\,\mathrm{Var}(X)/\sigma^2$ follows a ${\chi^2}_{n-1}$ distribution (See p. 211 of [27]). This choice of representation allows us to compare the histograms obtained to a theoretical curve that Y should follow if the normalized differences distributions in each box followed a $N(0,1)$ distribution, as is expected if the uncertainties are correctly estimated. The theoretical curve is deduced by cumulating the distributions of the Y term expected for each of the 2° boxes, considering $\sigma = 1$.

The reliability of the salinity variability derived from GLORYS reanalysis will be discussed, based on comparisons with the salinity variabilities measured in-situ by sensors onboard ships.

Actually, Ship ThermoSalinoGraph (TSG) measurements are sampled at a few kilometers resolution along ship transects, hence allowing for an estimate of the variability at a higher resolution than GLORYS. We use the TSG-LEGOS-DM delayed mode data set derived from voluntarily observing ships collected, validated, archived and made freely available by the French Sea Surface Salinity Observation Service [28]. For that, we select adjusted values when available and only TSG data with quality flags = 1 and 2 ('good' or 'probably good').

As the SSS variability along a line is different from the SSS variability over a surface, for this exercise, a one-dimensional GLORYS variability is computed along ship lines: the standard deviation of salinity values from GLORYS reanalysis along 50 km-long lines, with a direction close to ship transects (with a precision of ±22.5°). Fitting the variability to the direction of the ship transect allows for the possible anisotropy of the SSS field.

3. Results

We first consider global maps of the main terms in the uncertainties balance Equation (1) after integrating them over the 2016–2018 period by taking their quadratic mean. After this qualitative and raw analysis (temporal correlations between the various terms are neglected in that analysis), a thorough analysis is presented based on an exact computation of Equation (1).

3.1. The Different Contributions to the Uncertainty Balance

Before analyzing the observed differences between CCI+SSS and Argo salinities normalized by the uncertainties for each collocated matchup, we focus on the main contributors to Equation (1), temporally integrated over the 2016–2018 period (Figure 3). Qualitatively, the STD differences between Argo and CCI salinities (STD (CCI7-Argo), Figure 3a) and the quadratic mean of U_{sat} from CCI data (Figure 3b) are similar in most open ocean regions, where the natural variability of salinity is expected to be low (below 0.2). The STD of CCI7-Argo SSS seems therefore bounded by the value of the satellite uncertainty U_{sat} in regions of low variability. High values of STD (CCI7-Argo) (>0.5, going up to 1) are observed in Figure 3a in regions where natural variability is important, for example, in river plumes (notably the Amazon, Congo, Malvinas, Ganga Brahmaputra and Mississippi) and in areas

of important fronts (Gulf Stream region, Agulhas return current and Kurushio). In these regions, U_{sat} is also higher than in low variability regions due to an increased uncertainty in the CCI weekly SSS field related to the temporal undersampling of SMOS and SMAP, but U_{sat} remains, in these regions, lower than the STD(CCI7-Argo). The difference between the squared terms (STD^2(CCI7-Argo)—mean ($U_{sat}{}^2$), Figure 3c) and $U_{mis}{}^2$ (Figure 3d) agree qualitatively well, even though U_{mis} appears higher in river plumes between 20°N and 20°S. In a few regions, notably near Japan and in the Labrador Current region, we observe large values of STD(CCI7-Argo) that are stronger than U_{sat} and U_{mis}. These differences are likely due to the frequent presence of RFIs in these regions [26].

3.2. Detailed Analysis of Uncertainties Balance

3.2.1. Distribution of Reduced Differences

We first analyze the distribution of all differences taken between 2016 and 2018. Figure 4 shows the distribution obtained over the global ocean, and Figure 5 shows the distributions obtained in the various areas indicated on Figure 2 and Table 1. The corresponding STD of the distributions are in Table 2.

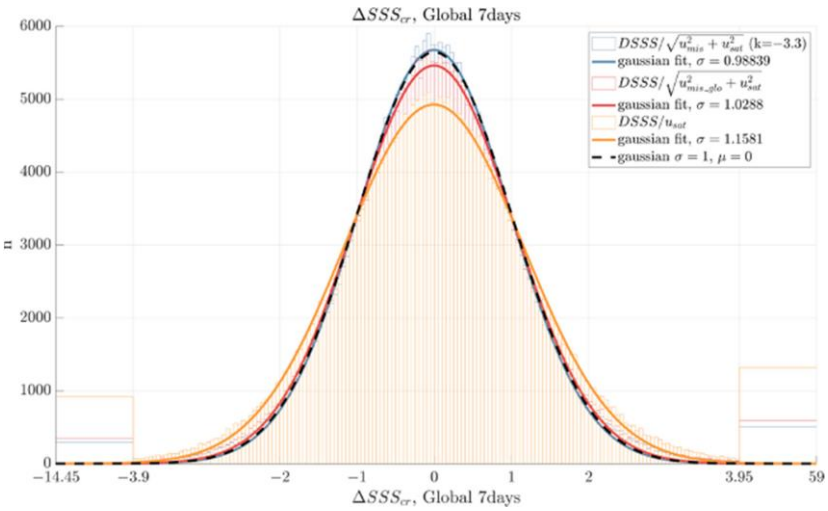


Figure 4. Distribution of differences between Argo floats and CCI data normalized with U_{sat} (orange), with U_{sat} and U_{mis_glo} (red) and with U_{sat} and U_{mis} (blue), and corresponding Gaussian fits, over the global ocean. The black line corresponds to a theoretical Gaussian distribution with a standard deviation of 1. Corresponding STD are reported in Table 2.

Table 2. STD of the distributions of the normalized differences between Argo and CCI v3.2 weekly products, in the regions defined in Table 1.

Region	U_{sat}	U_{sat} + U_{mis_glo}	U_{sat} + U_{mis}
Global	1.158	1.029	0.988
Gulf Stream	1.424	0.904	1.138
Amazon plume	1.050	1.202	0.859
Agulhas return current	1.163	1.059	1.022
South Pacific Ocean	1.017	0.978	0.964

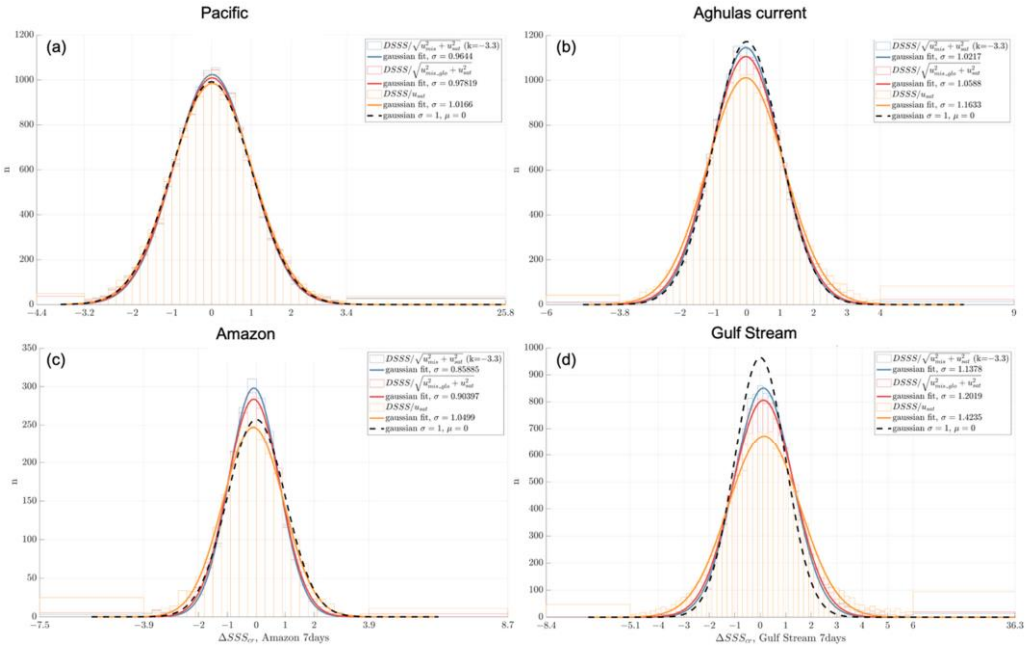


Figure 5. Same as Figure 4 for regions defined on Table 1: (**a**) Pacific; (**b**) Aghulas Current; (**c**) Amazon; (**d**) Gulf Stream. Corresponding STD are reported in Table 2.

In order to estimate the impact of the uncertainty mismatch U_{mis_glo} on the comparisons between in-situ Argo values and CCI products, we analyze the STD of the differences normalized by:

(a) The satellite uncertainty U_{sat} only (orange curves);
(b) The quadratic mean of U_{sat} and U_{mis_glo} (red curves); and
(c) The quadratic mean of U_{sat} and U_{mis} (blue curves).

We then test the closeness of the distribution of the error-reduced salinity differences to a Gaussian distribution with a STD equal to 1 as proposed by [6].

A Gaussian fit (mean and STD estimated using Matlab Non-Linear Least Squares fitting method) is superimposed on the different histograms, and we consider the standard deviation of this fit in each case. If the uncertainties are correctly estimated, we expect the normalized difference to follow a Gaussian distribution with a standard deviation of 1 and mean of 0; such a distribution is represented in the black dotted lines. This Gaussian distribution is calculated by considering the same number of measurements as the populations studied, i.e., the distributions have the same integral value. The outliers at the ends of the histograms have been gathered into a single class.

These figures show a clear improvement of the distributions when the sampling mismatch uncertainty is taken into account: over the global ocean, the standard deviation goes from a value of 1.16 with U_{sat} only (orange curve), which is too large, to a value of 1.03 much closer to unity with the quadratic sum of U_{sat} and U_{mis_glo} (red curve). Using U_{mis} (blue curve) results in a STD of 0.99, very close to the value of 1 we are looking for.

In addition, taking into account U_{mis_glo} considerably reduces the distribution tails: the values higher than 3.9 are reduced by about one half, and even more with U_{mis}.

More relevant comparisons can be made by focusing on regions of particularly high or low variability. First, in the low variability region of the eastern South Pacific, we observe that the uncertainty that plays a major role is U_{sat}, and that the addition of U_{mis_glo} has little impact on the distribution of differences. On Figure 5a, the STD of the red and blue

curves taking into account U_{mis_glo} are slightly too low, which means that U_{mis_glo} or U_{sat} is slightly overestimated in this region.

In the variable regions, the improvement is not homogeneous. In the region of the Agulhas current retroflection (Figure 5b), we obtain good results, taking into account U_{mis_glo} and U_{mis} allows one to obtain a STD of 1.05 and 1.02, respectively.

In the Gulf Stream region, Figure 5d, the histograms are under the black curve meaning that U_{mis_glo} or U_{sat} are too low. Taking into account U_{mis_glo} or U_{mis} allows one to get closer to a Gaussian of standard deviation of 1, going from a STD = 1.42 for the orange curve to a STD = 1.20 or STD = 1.13 with U_{mis_glo} and with U_{mis}, respectively. This corresponds to an improvement of about 30% but remains imperfect. This may be related to remaining seasonal biases observed in this region in the CCI data whose origin remains under study.

In the Amazon plume (Figure 5c), on the other hand, the orange curve is already close to a Gaussian distribution with STD = 1, and adding U_{mis_glo} and U_{mis} has a too strong impact. This could be related to uncertainty in GLORYS derived variability, as discussed in next section.

To highlight the potential of the method to validate U_{sat}, we compare the standard deviation values to the distributions obtained with the previous version of the CCI products (v2.3), for the global ocean, in which U_{sat} was estimated with a simplified approach.

With version 2.3 at global scale, the STD obtained was less than 1 (standard deviation of 0.93 with U_{mis_glo} and 0.89 with U_{mis}). In version 2.3, the errors were therefore overestimated by about 12% and particularly too high in regions of low variability. This has been corrected in version 3.2. Histograms for version 2.3 are available in Supplementary Materials.

For monthly products (figures available in Supplementary Materials), the superposition of histograms shows a clear improvement in the distribution of reduced differences when mismatch uncertainty is taken into account, both at the global level and in the variable regions. Indeed, this shifts from a STD always higher than 1 (1.55 at the global scale) to a STD close to 1 (1.1 with U_{mis_glo}, 1.003 with U_{mis}). In the Pacific region, the importance of mismatch uncertainty is less, but taking it into account also allows one to approach the STD = 1 curve. The histograms on the variable regions yield the same conclusions as with the weekly products.

3.2.2. Global Distributions

We now investigate further the spatial distribution of STD computed in 2° boxes. In this section, we focus on the validation of the CCI v3.2 weekly SSS and associated uncertainties, taking into account, step by step, the different sources of uncertainties involved in Equation (1) (Figure 6) and in 2° boxes to provide a better understanding of the geographical variations of the different sources of uncertainty. As in the previous section, the three normalization methods are evaluated here.

Figure 7 shows histograms of the variances multiplied by the number of measurements in the 2° boxes shown in Figure 6a,c,d. The black dashed curve represents the theoretical curve that these histograms should follow if the normalized differences distributions in each box follow a $N(0,1)$ distribution, as we expect when the uncertainties are correctly estimated.

The introduction of U_{mis_glo} (Figure 6c) reduces the very large STD in highly variable regions such as the Gulf Stream or the Agulhas Current retroflection. This reduction is even stronger with U_{mis} (Figure 6d). This can be seen in the histograms (Figure 7), where the red and blue histograms, which take into account U_{mis_glo} and U_{mis}, respectively, are much closer to the black theoretical curve for high values (above 50) corresponding to high variances than the orange histogram, where the differences are normalized by U_{sat} only. Quantitatively, the correlation coefficient between the χ^2 theoretical distribution and the one obtained with U_{sat} only is 0.95, and, respectively, 0.97 and 0.98 when taking into account U_{mis_glo} or U_{mis}.

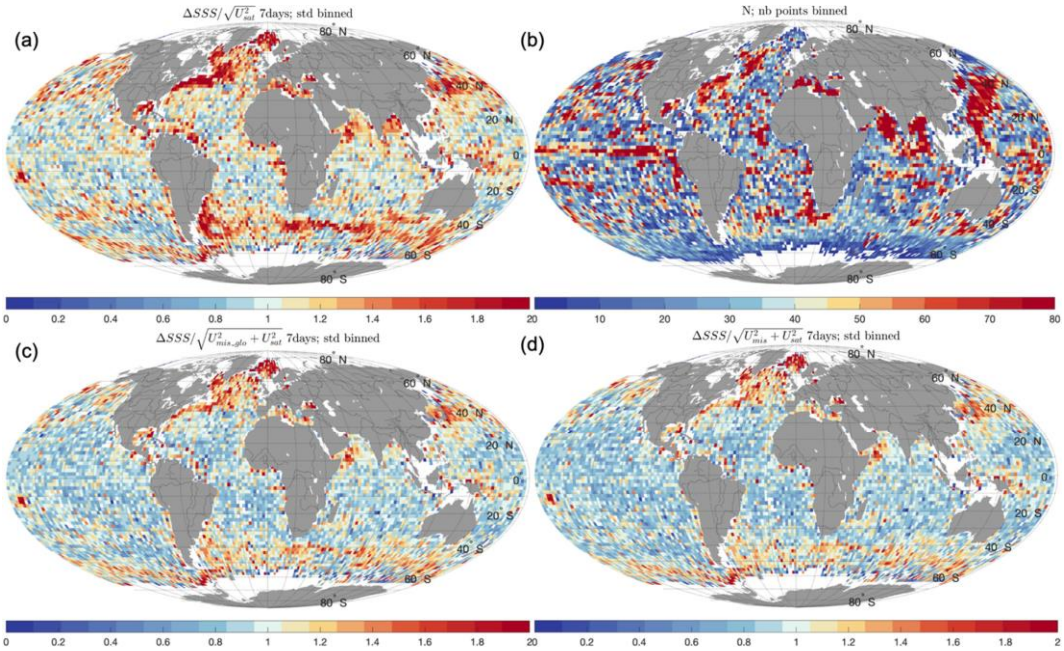


Figure 6. Standard deviations of CCI-Argo differences normalized by the various sources of uncertainties, in 2° boxes. Only boxes with more than three Argo measurements are considered. (**a**,**c**,**d**) Maps of the STD of the differences normalized Equation (1) by (**a**) U_{sat}; (**c**) U_{sat} and U_{mis_glo}; and (**d**) U_{sat} and U_{mis}. (**b**) Number of collocated points in each 2° box.

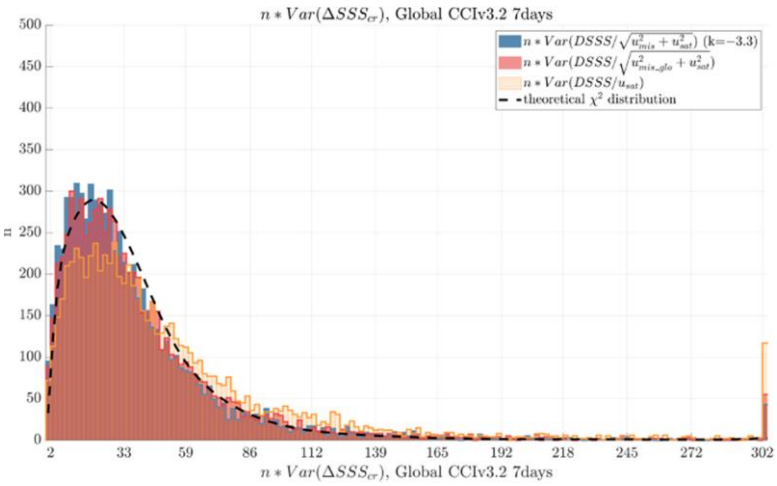


Figure 7. Histograms (bar graph) of number of points multiplied by variance in the pixels shown in Figure 6: (a) (orange), (c) (red) and (d) (blue). Points above 300 are grouped in one single class. This histogram is expected to follow a Chi2 distribution (dashed line) if Equation (1) holds for each pixel of the maps.

This result is similar and more pronounced for monthly products (see maps in Supplementary Materials). By normalizing the differences by U_{sat} only, the STD obtained is clearly

greater than 1 and often even greater than 2 in a large majority of the 2° boxes. Taking into account U_{mis_glo} or U_{mis} gives quite similar maps (Figure 6c,d), which again shows the importance of mismatch uncertainties in the validations, especially for monthly products. The histograms obtained for the monthly products also show this clear improvement, which is strengthened with U_{mis}. The correlation coefficient between the χ^2 theoretical distribution and the one obtained with U_{sat} only is 0.81, and, respectively, 0.97 and 0.98 when taking into account U_{mis_glo} or U_{mis}.

When the same study was conducted on the CCI version 2 weekly products, the results were further from the calculated theoretical χ^2 curve, with a very large number of points at low values of n Var(X) indicating that the U_{sat} of version 2 was overestimated, mostly because of the simplified propagation of errors in version 2 instead of the full least square propagation of the errors implemented in version 3. The correlation coefficient between the χ^2 theoretical distribution and the one obtained with U_{sat} only is 0.71 and, respectively, 0.75 and 0.76 when taking into account U_{mis_glo} or U_{mis} for CCI v2.

4. Discussion

4.1. Estimation of the Sampling Mismatch Uncertainty

The issue of quantitative comparison between datasets with different spatio-temporal resolution is common to other research areas, such as the ocean model community, and methodologies of different complexities have been proposed to address it (e.g., [9]). In this study, we estimate the sampling mismatch uncertainty with a classical methodology, with our focus being not on the development of original methods for estimating sub-pixel SSS heterogeneity but rather on demonstrating possible improvements in satellite SSS validation by including a quantification of sampling mismatch effects in routine SSS validation exercises. In particular, the Pi-MEP validation platform does not yet include representativity uncertainties between satellite and in situ SSS, but it is planned to include different ways of taking them into account in the coming years.

One can question the legitimacy to use the GLORYS reanalysis to represent the in-situ point measurement. This product has several limitations.

The first limitation is the spatial resolution of the model, 1/12°, which corresponds to about 10 km near the equator, which is a higher resolution than the satellite salinity data but is still far from a point data. Nominally, this grid resolution corresponds to a Nyquist cutoff wavelength of about 20 km. It was not feasible in this study to use higher resolution simulations due to numerical computation limitations. It would nevertheless be of importance in further studies to look at the spectral information content of both GLORYS and CCI SSS products to confirm the nominal product resolutions considered in our study.

To counter this limitation, we have multiplied our uncertainties mismatch estimates by a coefficient, in order to adjust these values by taking into account the finer scales. This coefficient is calculated by assuming a PSD slope in $k^{-3.3}$ constant in time and space, but this slope could vary slightly according to regions and time. We note, however, a weak variation of the coefficient according to the slope of the spectrum: +(−)2% for a spectrum of slope of $k^{-3.2}$ ($k^{-3.4}$), compared to the used spectrum of slope $k^{-3.3}$.

To validate the sampling mismatch derived from GLORYS simulations, we have compared model variability to in-situ variability derived along ship tracks available between 2016 and 2018.

The GLORYS variability compared to TSG variability derived along merchant ships lines (Figure 8a,b) indicates that the differences are small, less than 0.02 for most measurements, with the GLORYS variability being generally slightly higher than the in-situ variability. The difference is greater in regions of high variability such as fronts or river flows but remains below ~20%, as shown in the histogram in Figure 8c. This result seems counter-intuitive as one would expect the GLORYS salinity variability to be lower since the resolution of the reanalysis is lower than the resolution of the ships measurements and since we did not add contribution for the small scales not resolved by GLORYS in these comparisons.

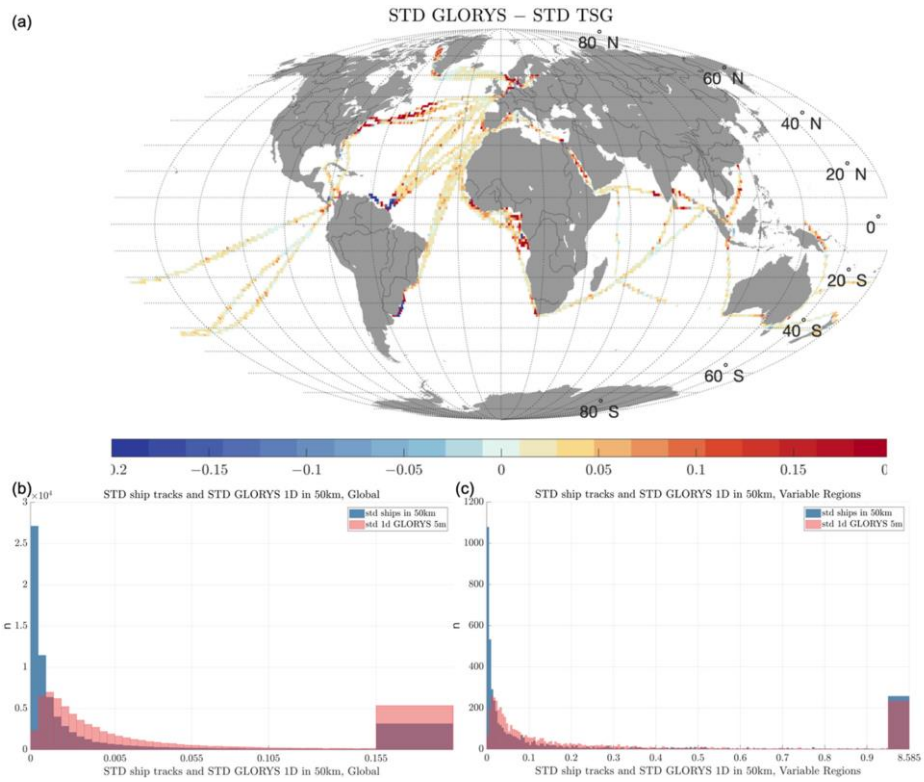


Figure 8. Comparison between GLORYS data standard deviation and in-situ variability. (**a**) Merchant ships averaged over 1° boxes; (**b**,**c**) histograms of Merchant ships STD (blue) and GLORYS STD (red) (**b**) globally, and (**c**) in very variable areas defined Table 1.

The observed discrepancies near river plumes may be due to a limitation of the GLORYS reanalysis, which uses climatological river run-offs as a forcing [29] (as explained in [23]) and thus does not take into account interannual variability in river discharge. The study [30] shows that the RMSD of the GLORYS model relative to Argo data decreases near the Amazon and Congo estuaries when assimilated with SMOS satellite data. This suggests that the spatial variability of the model is overestimated in the river plume regions, confirming the biases observed in the comparisons to merchant ships in these regions.

Another study [31] shows that sub-mesoscale structures are poorly represented in the GLORYS model, due to the too coarse spatial resolution. This could explain the differences observed in the Gulf Stream.

Overall, however, the observed differences between the TSG and GLORYS model variabilities are relatively small. We consider the GLORYS reanalysis variability to be a sufficiently good representation of the natural variability on a global scale, although we note that the differences are greater in regions of high variability.

The way we estimate U_{mis_glo} is close to the one used by [13] to estimate the Representation Error (RE), except that [13] uses higher resolution (1/48°) simulations. We have compared both estimates, made within an area of 50 km radius for U_{mis_glo} and within 40 km for RE. Maps of the median of U_{mis_glo} over the 3 years of our study (available in Supplementary Materials) are qualitatively in agreement with the 40 km RE (Table S5 of [13]).

4.2. Sampling Mismatch Uncertainty and Representativity Uncertainty Included in U_{sat}

U_{sat} quantifies the uncertainty on the weekly-50 km smoothed SSS related to the temporal undersampling of SMOS and SMAP. This temporal variability, taken into account in the CCI temporal optimal interpolation, is deduced from the GLORYS SSS fields smoothed to 50 km. Therefore, U_{sat} does not include information on the spatial variability at scales smaller than 50 km nor on the expected variability between a point in time measurement and a weekly field, contrary to U_{mis}. Nevertheless, a flaw in GLORYS SSS fields that would affect SSS fields at scales both larger and smaller than 50 km would lead to correlated errors in U_{sat} and U_{mis}. We cannot rule out this kind of error near river plumes between 20°N and 20°S.

4.3. Vertical Near-Surface Variability

As indicated in the methods section, we used the 5 m depth layer of the GLORYS model to take into account the fact that the majority of the ARGO data are taken at 5 m depth, and that the CCI data are corrected for a 'nearly-instantaneous' effect of rain. However, rain is not the only element generating a salinity gradient in the surface layer. To quantify the vertical variability of salinity and its influence on comparisons between Argo at 5 m and satellite surface salinity, we have calculated the GLORYS sub-footprint variability at the surface as well. Figure 9 shows the GLORYS STD at the surface minus the GLORYS STD at 5 m, averaged over 3 years.

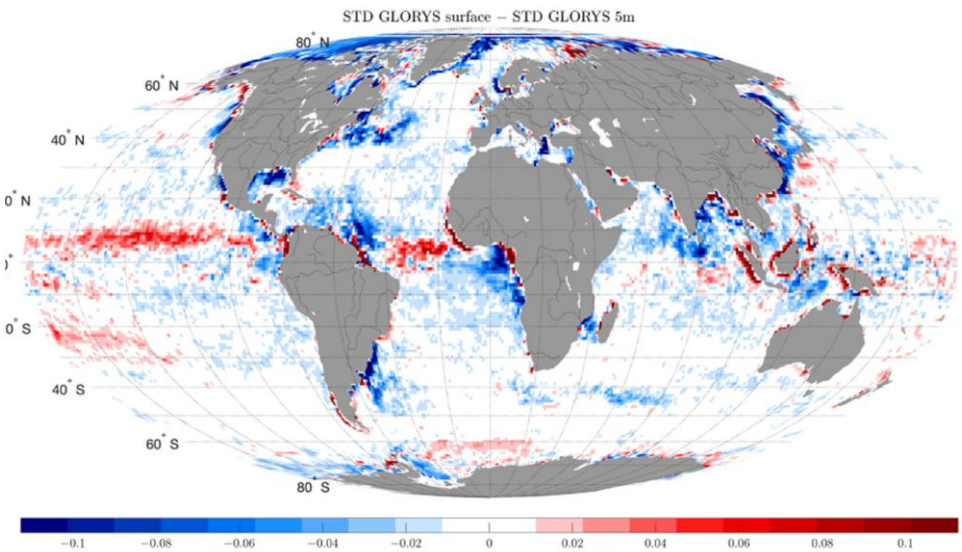


Figure 9. Difference between STD of GLORYS at surface minus STD of GLORYS at 5 m, computed over 2016–2018 period.

The differences obtained can reach 0.1, in regions where salinity is highly variable. We can distinguish three types of regions in Figure 9. In regions strongly impacted by rainfall, the variability of measurements at 5 m depth is lower than the surface variability. The observed differences are indeed very close to the impact of rain on salinity calculated by [32], from SMOS data, and this effect is corrected in the CCI products. Large differences between SSS and a few meters depth salinity are also expected in river plumes characterized by strong vertical stratification (e.g., [33]). However, in areas off the mouth of the river, the variability calculated at 5 m is often higher than the surface variability. The origin of these patterns is not well known; 5 m depth could be close to the halocline depth and surface fresh waters could be isolated from the variability of the layers below, but the assimilation of in

situ data often performed close 5 m depth could also generate some additional variability. Finally, in regions of low variability, the difference between the variability at 5 m and the surface variability is close to zero.

As the CCI version 3.2 product contains a correction for rainfall effects, it is wise to calculate a STD at 5 m depth in rainy regions. On the other hand, to be completely consistent, it would be necessary to use an STD based on a comparison of individual points at 5 m against a surface average value in regions where a large difference in variability between the surface and 5 m is observed but not affected by rain, such as close to fronts or river plumes. However, since the variability derived from GLORYS at 5 m depth is most of the time higher than the one obtained with in situ measurements (Figure 8), this effect is likely within the uncertainty of the STD derived from GLORYS simulations.

5. Conclusions

We find a remarkable agreement between CCI version 3.21 products (SSS and SSS uncertainties) and Argo upper salinities once the uncertainty due to sampling mismatch between CCI+SSS satellite products and in-situ Argo measurements is taken into account. This is particularly striking for the distributions of the differences between satellite and in situ salinities normalized by the sum of the uncertainties associated with each satellite-in situ colocation (Equation (1)): at global scale, when mismatch uncertainties are taken into account, the normalized distribution is very close to a Gaussian distribution with a unit sigma contrary to the one normalized with the satellite salinity uncertainty only (Figure 4). The role of the sampling mismatch is particularly important in regions with high variability, as shown in Figure 6. In regions with low variability, on the other hand, the contribution of the sampling mismatch uncertainty is very small compared to the satellite uncertainty. Taking into account U_{mis_glo} or U_{mis} in the validation allows the STD of the normalized differences to get very close to a χ^2 theoretical distribution (Figure 7; correlation coefficient of 0.95 with U_{sat} only and of 0.98 when taking into account sampling mismatches).

Even though the spatial resolution of the GLORYS reanalysis does not resolve very fine scale phenomena (<20 km), we find that they should also be taken into consideration to approximate the sampling mismatch uncertainties. At global scale, the STD of the normalized differences is 1.15 when only the satellite SSS uncertainty is considered and 1.03 when the GLORYS derived mismatch is taken into account. Moreover, we find that an efficient way to counter the limited spatial resolution of GLORYS is to adjust the GLORYS derived variabilities by a spectral analysis as proposed by [12]. With this correction, the global scale STD of the normalized differences equals 0.99.

The analyses shown in this main paper have been obtained with weekly CCI fields. Analyses of monthly CCI v3 data compared with Argo data (in Supplementary Information) give similar results but with a reinforced importance of the mismatch uncertainty compared to the uncertainty of the monthly satellite SSS (which is reduced with respect to the uncertainty of the weekly fields). Again, the spectral correction of GLORYS variability improves the comparisons.

The results obtained at global scale are corroborated by analyses of distributions over large regions. The standard deviation of the distribution of differences reduced by the quadratic sum of the uncertainties U_{sat} and U_{mis} has a standard deviation very close to 1 over the global ocean, slightly too high (1.05) in the variable regions and a little too low (0.98) in the region of low variability of the Pacific. These results are significantly better, up to 30% better in the Gulf Stream, than when the sampling mismatch uncertainty is not taken into account.

These results highlight the consistency of satellite uncertainties of CCI version 3 products at the global scale, considering the validation method proposed by [7]. We observe an overly pitted distribution of reduced differences in the Amazon region, corresponding to a 15% overestimate of the total variability. Although this could indicate an overestimation of U_{sat}, as was commented on in the discussion, the calculation of U_{mis_glo} in the river plume regions may be too high. Future studies should address this issue by comparing the

variabilities obtained from GLORYS to the ones estimated from other models or with other in situ datasets.

Conversely, in the Gulf Stream region, the distribution of reduced differences is too wide, and the STD is too high by about 15%, which suggests that U_{sat} is too low there. This could be related to remaining seasonal variation of biases at high northern latitudes possibly linked to ice contamination, and to calibration flaws related to sun or antenna temperature or RFIs impacts, which are not well represented in the U_{sat} values.

The interest of this method is also to carry out comparative validations between different products. The results of these tests on the previous version of the CCI products (version 2) highlights the clear improvement of uncertainty estimates in the new version related to modifications in the error propagation in the optimal interpolation methodology. This shows the importance of carrying such tests for the validation of satellite products and their uncertainties.

For reasons of data availability and computational time, we have restricted the study to three years during the period common to SMOS and SMAP. It would be interesting for complete validations to conduct a similar study for the whole period of the CCI products. Indeed, the information used to derive U_{sat}, the satellite measurements uncertainties and the representativity uncertainties is specific to each instrument and strongly differs for the Aquarius measurements. Aquarius SSS' uncertainties are lower than the uncertainties of SMOS and SMAP level 2 SSS, while its representativity uncertainties are larger due to the spatial integration over 100–150 km relative to 50 km and to a narrower swath leading to an increased undersampling. The work on level 4 CCI+SSS data presented here could also be applied to other types of data, by adapting the spatio-temporal scales on which the uncertainties due to sampling mismatches are calculated.

Supplementary Materials: The following supporting information can be downloaded at: https://www.mdpi.com/article/10.3390/rs14081878/s1. Figure S1: Monthly GLORYS SSS SFV, 15 February 2017. Figure S2: Same as Figures 4 and 5 of main paper, for CCI v3.2 monthly products. Figure S3: Same as Figures 4 and 5 of main paper, for CCI v2.3 weekly products. Figure S4: Same as Figures 4 and 5 of main paper, for CCI v2.3 monthly products. Figure S5: Same as Figures 6 and 7 of main paper, for CCI v3.2 monthly products. Figure S6: Same as Figures 6 and 7 of main paper, for CCI v2.3 weekly products. Figure S7: Same as Figures 6 and 7 of main paper, for CCI v2.3 monthly products. Table S1: Median SSS SFV, computed from GLORYS for a 50 km footprint for the all the months of the year, for comparison with Bingham 2021 results. Unitless color scale, with the colors scaling with the base 10 logarithm of the SFV. The month is given at the top of each panel.

Author Contributions: Conceptualization, C.T.-M., J.B. and J.-L.V.; methodology, C.T.-M., J.B., J.-L.V. and G.R.; software, C.T.-M., J.B., J.-L.V., A.C.H.M. and S.G.; validation, C.T.-M., J.B., J.-L.V., A.C.H.M., S.G. and G.R.; formal analysis, C.T.-M., J.B., J.-L.V. and A.C.H.M.; investigation, C.T.-M., J.B., J.-L.V., A.C.H.M. and G.R.; resources, J.B., S.G., N.R. and O.H.F.-d.; data curation, J.-L.V., G.R., and S.G.; writing—original draft preparation, C.T.-M. and J.B.; writing—review and editing, C.T.-M., J.B., J.-L.V., G.R., A.C.H.M. and S.G.; visualization, C.T.-M., J.B., J.-L.V. and G.R.; supervision, J.B., J.-L.V. and G.R.; project administration, R.S. and R.C.; funding acquisition, J.B., N.R., R.C. and O.H.F.-d. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: Clovis Thouvenin-Masson is cofunded by a CNES and ACRI-st (convention 3233). This study was funded by ESA CCI contract 4000123663/18/I-NB and by CNES TOSCA SMOS-Ocean project.

Data Availability Statement: SSS CCI datasets are freely available [14]. The Pi-MEP MDB are freely available as NetCDF files [34] and corresponding validation reports are available on [35].

Acknowledgments: We thank Elisabeth Rémy from Mercator-Ocean for valuable information about GLORYS simulations and three anonymous reviewers for their careful comments and suggestions.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Appendix A

In this appendix, we describe the method for calculating U_{mis}, based on a spectral analysis of surface salinity. This method has been developed in [12], Appendix A.

The variance of a signal between a chosen wavelength and the Nyquist wavelength can be inferred assuming that the slope of the spectrum between the two wavelengths is reasonably known.

The variance of a signal is defined as the integral of its PSD:

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} \int_{-\pi}^{\pi} \overline{PSD}(k) k d\theta dk} \tag{A1}$$

where $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ and k_n is the Nyquist wavenumber.

We consider the power spectral density of salinity to have a power-law scaling [12,20]

$$y(k) = b * k^{-m} \tag{A2}$$

where m corresponds to the slope of the PSD when viewed as a log-log plot and b is the y-intercept of the PSD.

Introducing (A1) into (A2) gives

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} \int_{-\pi}^{\pi} b * k^{-m} k d\theta dk} \tag{A3}$$

Additionally, integrating with respect to θ,

$$\sigma_k = \sqrt{\int_k^{k_n} 2\pi b k^{1-m} dk} \tag{A4}$$

And with respect to k,

$$\sigma_k = \sqrt{\frac{2\pi b}{m-2}(k^{2-m} - {k_n}^{2-m})} \tag{A5}$$

We can express this formula as a function of wavelength:

$$\sigma_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi b}{m-2}(\lambda^{m-2} - {\lambda_n}^{m-2})} \tag{A6}$$

In this equation, λ is the wavelength below which we calculate the variance and λ_n is the Nyquist wavelength.

References

1. Li, G.; Cheng, L.; Zhu, J.; Trenberth, K.E.; Mann, M.E.; Abraham, J.P. Increasing ocean stratification over the past half-century. *Nat. Clim. Chang.* **2020**, *10*, 1116–1123. [CrossRef]
2. Bindoff, N.L.; Cheung, W.W.L.; Kairo, J.G.; Arístegui, J.; Guinder, V.A.; Hallberg, R.; Hilmi, N.J.M.; Jiao, N.; Karim, M.S.; Levin, L.; et al. Changing ocean, marine ecosystems, and dependent communities. In *IPCC Special Report on the Ocean and Cryosphere in a Changing Climate*; Intergovernmental Panel on Climate Change: Geneva, Switzerland, 2019; pp. 477–587.
3. Reul, N.; Grodsky, S.; Arias, M.; Boutin, J.; Catany, R.; Chapron, B.; D'Amico, F.; Dinnat, E.; Donlon, C.; Fore, A.; et al. Sea surface salinity estimates from spaceborne L-band radiometers: An overview of the first decade of observation (2010–2019). *Remote Sens. Environ.* **2020**, *242*, 111769. [CrossRef]
4. Vinogradova, N.; Lee, T.; Boutin, J.; Drushka, K.; Fournier, S.; Sabia, R.; Stammer, D.; Bayler, E.; Reul, N.; Gordon, A.; et al. Satellite Salinity Observing System: Recent Discoveries and the Way Forward. *Front. Mar. Sci.* **2019**, *6*, 243. [CrossRef]
5. Boutin, J.; Reul, N.; Koehler, J.; Martin, A.; Catany, R.; Guimbard, S.; Rouffi, F.; Vergely, J.L.; Arias, M.; Chakroun, M.; et al. Satellite-Based Sea Surface Salinity Designed for Ocean and Climate Studies. *J. Geophys. Res. Oceans* **2021**, *126*, e2021JC017676. [CrossRef]

6. Martin, A.C.H.; Guimbard, S.; Koehler, J.; Akhil, V.P.; Vialard, J.; Houdegnonto, O.; Kolodziejczyk, N.; Boutin, J.; Reul, N.; Catany, R. Climate Change Initiative+ (CCI+) Phase 1 Sea Surface Salinity: Product Validation and Intercomparison Report (PVIR) Version 3.0. 2021. Available online: http://nora.nerc.ac.uk/id/eprint/531913 (accessed on 13 February 2022).
7. Merchant, C.J.; Paul, F.; Popp, T.; Ablain, M.; Bontemps, S.; Defourny, P.; Hollmann, R.; Lavergne, T.; Laeng, A.; de Leeuw, G.; et al. Uncertainty information in climate data records from Earth observation. *Earth Syst. Sci. Data* **2017**, *9*, 511–527. [CrossRef]
8. Boutin, J.; Chao, Y.; Asher, W.E.; Delcroix, T.; Drucker, R.; Drushka, K.; Kolodziejczyk, N.; Lee, T.; Reul, N.; Reverdin, G.; et al. Satellite and In Situ Salinity: Understanding Near-Surface Stratification and Subfootprint Variability. *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **2016**, *97*, 1391–1407. [CrossRef]
9. Vinogradova, N.T.; Ponte, R.M. Small-Scale Variability in Sea Surface Salinity and Implications for Satellite-Derived Measurements. *J. Atmos. Ocean. Technol.* **2013**, *30*, 2689–2694. [CrossRef]
10. Bingham, F.; Fournier, S.; Brodnitz, S.; Ulfsax, K.; Zhang, H. Matchup Characteristics of Sea Surface Salinity Using a High-Resolution Ocean Model. *Remote Sens.* **2021**, *13*, 2995. [CrossRef]
11. Bingham, F.; Li, Z. Spatial Scales of Sea Surface Salinity Subfootprint Variability in the SPURS Regions. *Remote Sens.* **2020**, *12*, 3996. [CrossRef]
12. D'Addezio, J.M.; Bingham, F.; Jacobs, G.A. Sea surface salinity subfootprint variability estimates from regional high-resolution model simulations. *Remote Sens. Environ.* **2019**, *233*, 111365. [CrossRef]
13. Bingham, F.M.; Brodnitz, S.; Fournier, S.; Ulfsax, K.; Hayashi, A.; Zhang, H. Sea Surface Salinity Subfootprint Variability from a Global High-Resolution Model. *Remote Sens.* **2021**, *13*, 4410. [CrossRef]
14. Boutin, J.; Vergely, J.-L.; Reul, N.; Catany, R.; Koehler, J.; Martin, A.C.H.; Rouffi, F.; Arias, M.; Chakroun, M.; Corato, G.; et al. ESA Sea Surface Salinity Climate Change Initiative (Sea_Surface_Salinity_cci): Weekly and Monthly Sea Surface Salinity Product, v03.21, from 2010 to 2020. NERC EDS Centre for Environmental Data Analysis, 23 December 2021. Available online: http://dx.doi.org/10.5285/5920a2c77e3c45339477acd31ce62c3c (accessed on 13 February 2022).
15. Perrot, X.; Boutin, J.; Vergely, J.L.; Rouffi, F.; Martin, A.; Guimbard, S.; Koehler, J.; Reul, N.; Catany, R.; Cipollini, P.; et al. CCI+SSS, A New SMOS L2 Reprocessing Reduces Errors on Sea Surface Salinity Time Series. In Proceedings of the International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), Brussels, Belgium, 11–16 July 2021; pp. 7457–7460. [CrossRef]
16. Vergely, J.L.; Reul, N.; Chakroun, M.; Catany, R.; Cipollini, P. Climate Change Initiative+ (CCI+) Phase 1: Sea Surface Salinity: Algorithm Theoretical Development Basis Document (ATBD). 2021, p. 85. Available online: https://dap.ceda.ac.uk/neodc/esacci/sea_surface_salinity/docs/v03.21/SSS_cci-D2.3-ATBD-v3.1.pdf (accessed on 13 February 2022).
17. Brodzik, M.J.; Billingsley, B.; Haran, T.; Raup, B.; Savoie, M.H. EASE-Grid 2.0: Incremental but Significant Improvements for Earth-Gridded Data Sets. *ISPRS Int. J. Geo-Inf.* **2012**, *1*, 32–45. [CrossRef]
18. Gaillard, F.; Reynaud, T.; Thierry, V.; Kolodziejczyk, N.; Von Schuckmann, K. In Situ–Based Reanalysis of the Global Ocean Temperature and Salinity with ISAS: Variability of the Heat Content and Steric Height. *J. Clim.* **2016**, *29*, 1305–1323. [CrossRef]
19. Supply, A.; Boutin, J.; Reverdin, G.; Vergely, J.L.; Bellenger, H. Variability of Satellite Sea Surface Salinity Under Rainfall. In *Satellite Precipitation Measurement*; Levizzani, V., Kidd, C., Kirschbaum, D.B., Kummerow, C.D., Eds.; Springer International Publishing: Cham, Switzerland, 2020; Volume 2, pp. 1155–1176.
20. ARGO. Argo Float Data and Metadata from Global Data Assembly Centre (Argo GDAC). SEANOE. Available online: https://doi.org/10.17882/42182 (accessed on 13 February 2022). [CrossRef]
21. Guimbard, S.; Reul, N.; Sabia, R.; Herlédan, S.; Khoury Hanna, Z.E.; Piollé, J.-F.; Paul, F.; Lee, T.; Schanze, J.J.; Bingham, F.M.; et al. The Salinity Pilot-Mission Exploitation Platform (Pi-MEP): A Hub for Validation and Exploitation of Satellite Sea Surface Salinity Data. *Remote Sens.* **2021**, *13*, 4600. [CrossRef]
22. Kolodziejczyk, N.; Hernandez, O.; Boutin, J.; Reverdin, G. SMOS salinity in the subtropical North Atlantic salinity maximum: 2. Two-dimensional horizontal thermohaline variability. *J. Geophys. Res. Oceans* **2015**, *120*, 972–987. [CrossRef]
23. Lellouche, J.-M.; Greiner, E.; Le Galloudec, O.; Garric, G.; Regnier, C.; Drevillon, M.; Benkiran, M.; Testut, C.-E.; Bourdalle-Badie, R.; Gasparin, F.; et al. Recent updates to the Copernicus Marine Service global ocean monitoring and forecasting real-time 1/12° high-resolution system. *Ocean Sci.* **2018**, *14*, 1093–1126. [CrossRef]
24. Lellouche, J.M.; Greiner, E.; Bourdalle-Badie, R.; Garric, G.; Angelique, M.; Drevillon, M.; Bricaud, C.; Hamon, M.; Le Galloudec, O.; Regnier, C.; et al. The Copernicus Global 1/12° Oceanic and Sea Ice GLORYS12 Reanalysis. *Front. Earth Sci.* **2021**, *9*, 585.
25. Bingham, F.; Brodnitz, S.; Yu, L. Sea Surface Salinity Seasonal Variability in the Tropics from Satellites, Gridded In Situ Products and Mooring Observations. *Remote Sens.* **2020**, *13*, 110. [CrossRef]
26. Wong, A.P.S.; Wijffels, S.E.; Riser, S.C.; Pouliquen, S.; Hosoda, S.; Roemmich, D.; Gilson, J.; Johnson, G.C.; Martini, K.; Murphy, D.J.; et al. Argo Data 1999–2019: Two Million Temperature-Salinity Profiles and Subsurface Velocity Observations from a Global Array of Profiling Floats. *Front. Mar. Sci.* **2020**, *7*, 700. [CrossRef]
27. Emery, W.J.; Thomson, R.E. (Eds.) Statistical Methods and Error Handling. In *Data Analysis Methods in Physical Oceanography*; Elsevier Science: Amsterdam, The Netherlands, 2001; pp. 193–304.
28. Alory, G.; Delcroix, T.; Téchiné, P.; Diverrès, D.; Varillon, D.; Cravatte, S.; Gouriou, Y.; Grelet, J.; Jacquin, S.; Kestenare, E.; et al. The French contribution to the voluntary observing ships network of sea surface salinity. *Deep Sea Res. Part I Oceanogr. Res. Pap.* **2015**, *105*, 1–18. [CrossRef]
29. Dai, A.; Qian, T.; Trenberth, K.E.; Milliman, J.D. Changes in Continental Freshwater Discharge from 1948 to 2004. *J. Clim.* **2009**, *22*, 2773–2792. [CrossRef]

30. Martin, M.J.; Remy, E.; Tranchant, B.; King, R.R.; Greiner, E.; Donlon, C. Observation impact statement on satellite sea surface salinity data from two operational global ocean forecasting systems. *J. Oper. Oceanogr.* **2020**, 1–17. [CrossRef]
31. Chassignet, E.P.; Xu, X. Impact of Horizontal Resolution (1/12° to 1/50°) on Gulf Stream Separation, Penetrtion, and Variability. *J. Phys. Oceanogr.* **2017**, *47*, 1999–2021. [CrossRef]
32. Supply, A.; Boutin, J.; Vergely, J.-L.; Martin, N.; Hasson, A.; Reverdin, G.; Mallet, C.; Viltard, N. Precipitation Estimates from SMOS Sea-Surface Salinity. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **2018**, *144* (Suppl. S1), 103–119. [CrossRef]
33. Houndegnonto, O.J.; Kolodziejczyk, N.; Maes, C.; Bourlès, B.; Da-Allada, C.Y.; Reul, N. Seasonal Variability of Freshwater Plumes in the Eastern Gulf of Guinea as Inferred from Satellite Measurements. *J. Geophys. Res. Oceans* **2021**, *126*. [CrossRef]
34. PIMEP Matchups Database. Available online: https://pimep.ifremer.fr/diffusion/data/ (accessed on 13 February 2022).
35. PIMEP Matchups Reports. Available online: https://www.salinity-pimep.org/reports/mdb.html (accessed on 13 February 2022).

4) Validation des résultats avec d'autres modèles

Comme je l'ai évoqué dans la publication ci-dessus, une limitation de ce travail est la dépendance forte des estimations de l'erreur de représentativité de la salinité satellitaire à la qualité et la précision de la simulation numérique utilisée. Pour vérifier les résultats obtenus dans la région de l'Amazone, dans laquelle on a détecté une surestimation des incertitudes liées à la mesure satellitaire, j'ai appliqué les mêmes tests en utilisant la variabilité des SSS simulées par APLUME36 (J. Jouanno, pers. comm.). Les résultats obtenus sont cohérents avec les résultats obtenus avec GLORYS et montrent que la surestimation des incertitudes provient bien des incertitudes satellitaires et non des variabilités déduites du modèle (Figure III.6).

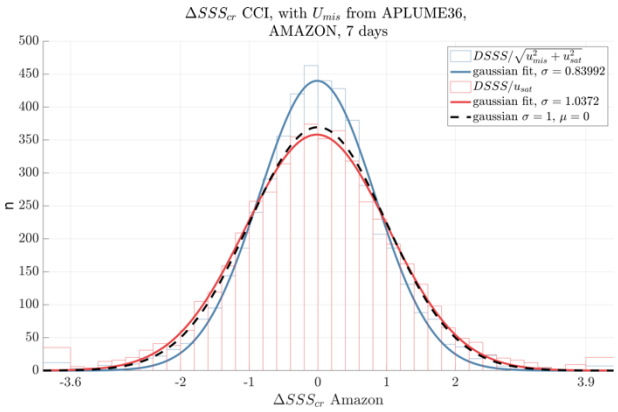


Figure III.6 : Validation des SSS CCI v3.4 hebdomadaires et de leurs incertitudes dans la région de l'Amazone, avec des incertitudes liées aux différences d'échantillonnages calculées à partir de la simulation APLUME36 : distribution des différences CCI - Argo réduites par la somme des incertitudes, sans prendre en compte l'échantillonnage (rouge) et en prenant en compte l'échantillonnage (bleu). En noir, la courbe à atteindre si les incertitudes sont bien représentées.

J'ai ajouté un cas d'étude supplémentaire à ceux développés dans l'article, la région de l'upwelling du Sénégal-Mauritanie que j'ai étudié en détail dans la suite de cette thèse (Figure III.7). Les résultats obtenus dans cette région montrent une bonne estimation des incertitudes sur la mesure satellitaire, avec une distribution s'approchant d'une gaussienne d'écart-type valant 0.95. Les estimations des incertitudes liées aux erreurs de représentativité à partir des simulations CROCO et GLORYS donnent en moyenne sur toute la zone des résultats assez similaires mais on observe localement des différences. Je reviendrai dans la section V sur le réalisme des simulations CROCO. Les cartes de différences réduites dans des boîtes de 2° montrent que la simulation CROCO semble sous-estimer la variabilité dans la région Nord de la pointe du cap vert. L'origine de cette sous-estimation reste à définir, elle est accompagnée d'une surestimation de la SSS comme on le verra dans la section V. Une hypothèse est que l'effet du fleuve Sénégal sur l'océan, sur la salinité et sa variabilité est sous-estimé dans les simulations CROCO.

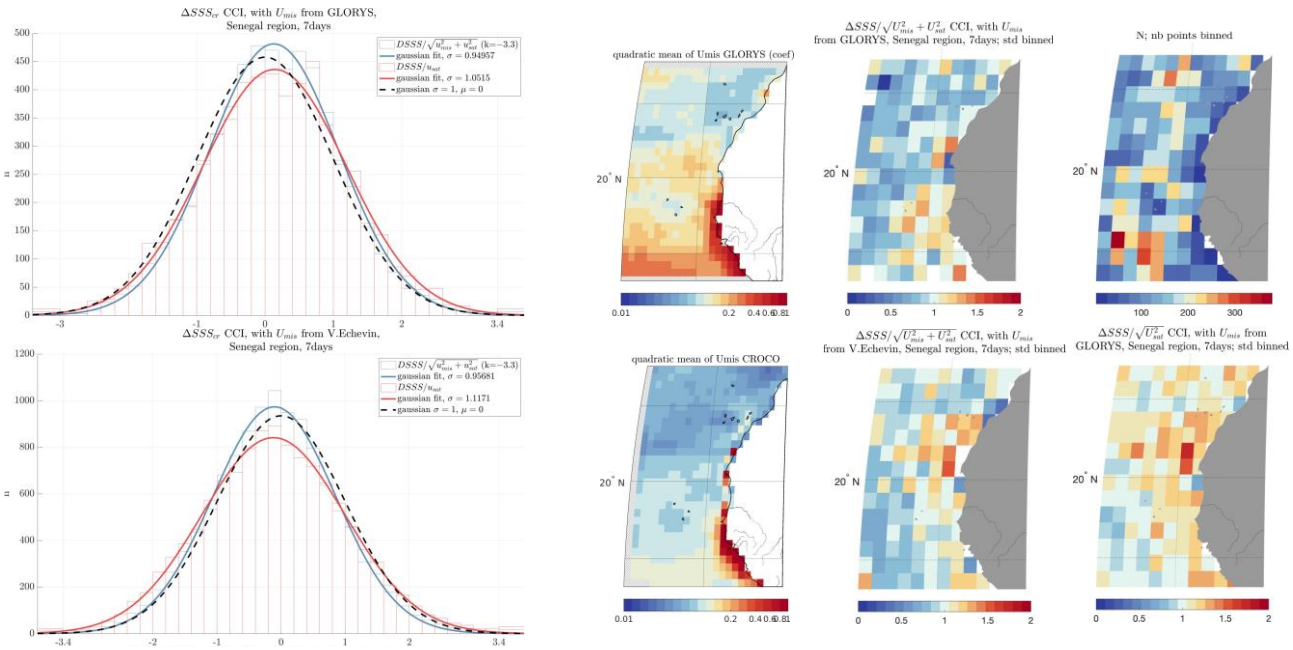


Figure III.7 : Validation des SSS CCI v3.4 hebdomadaires et de leurs incertitudes dans la région de l'upwelling du Sénégal-Mauritanie, avec des incertitudes liées aux différences d'échantillonnages calculées à partir de la simulation GLORYS (haut) et CROCO (bas). Les courbes sont décrites Figure III.6. Les cartes représentent (gauche) la moyenne quadratique des incertitudes liées aux diférences d'échantillonnage (Umis) sur des pixels de 1°, (milieu) les différences CCI – Argo réduites en prenant en compte Umis, (droite) en haut le nombre de points argo dans chaque boîte, et en bas les différences CCI – Argo sans prendre en compte Umis.

5) Prolongation de l'étude sur la période CCI complète

Dans la publication ci-dessus, par manque de disponibilité des données GLORYS je m'étais restreint à une période limitée de trois ans entre 2016 et 2018. J'ai pu *a posteriori* étendre l'étude à toute la période couverte par les données satellitaires, ce qui permet de valider séparément les périodes utilisant SMOS seulement, entre 2010 et mi 2011, SMOS et Aquarius entre mi-2011 et mi-2015, SMOS et SMAP entre 2015 et 2020, ainsi que sur la période complète. Les distributions réduites sur l'océan global et sur les quatre périodes décrites ci-dessus sont visibles Figure III.8. Les valeurs des écart types des distributions réduites sont décrites dans le Tableau 4, en ne prenant en compte que les incertitudes liées à la mesure satellitaire Usat, avec Usat et les incertitudes liées à la différence d'échantillonnage en considérant la variabilité du modèle GLORYS Umis_glo, et avec Usat et Umis. Le Tableau 4 présente les résultats pour la version 3.2 des CCI, le

Tableau 5 montre les tests des champs CCI version 4.4.

On retrouve les résultats obtenus dans l'étude pour la version 3, pour la période qui correspond approximativement à la période où SMOS et SMAP sont disponibles. Dans ce cas, le test est concluant, on obtient une distribution gaussienne d'écart type très proche de 1. C'est également le cas lorsqu'on regarde la période complète entre 2010 et 2020, on s'en éloigne légèrement sur la période Aquarius. Sur la période SMOS par contre, les incertitudes liées aux mesures SMOS semblent sur cette période surestimées, l'écart type de la gaussienne obtenue est de 0.89 pour le champ hebdomadaire ou 0.93 pour le champ mensuel, légèrement inférieure à 1. Sur la région de l'Amazone, on confirme ici les résultats de la publication, les incertitudes satellitaires sont surestimées, sur toutes les périodes, pour les champs hebdomadaires et mensuels. La validation donne de bons résultats dans la région de la rétroflexion du courant des aiguilles pour la période SMOS SMAP et sur la période complète, mais avec des écart-types inférieurs à 1 lorsqu'on regarde les périodes SMOS seul et Aquarius. Dans la région Pacifique, peu variable, l'ajout de l'incertitude liée à la différence d'échantillonnage dans les comparaisons modifie peu les résultats. On obtient cependant des écart-types inférieurs à 1.

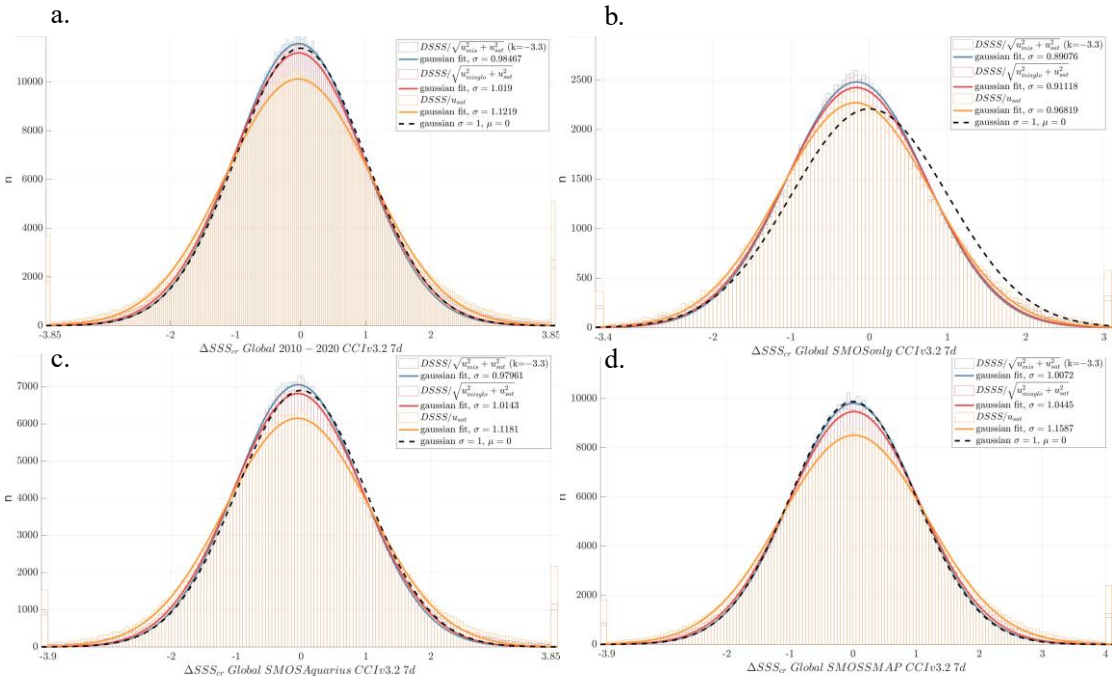


Figure III.8 : Validation des données CCI v3.2 hebdomadaires sur l'océan global, et sur différentes périodes : a. entre 2010 et 2020, b. sur la période SMOS seul, c. sur la période SMOS Aquarius, d. sur la période SMOS SMAP. Voir la figure 4 de la publication ci-dessus pour une description des courbes.

Tableau 4 : résultat des validations des salinités CCI v3.2 hebdomadaires et mensuelles sur différentes régions et différentes périodes. Les chiffres représentent l'écart type des distributions des différences réduites par l'incertitude sur la mesure satellitaire seule (Usat), les incertitudes Usat et l'incertitude liée à la différence d'échantillonnage, sans étendre vers les fines échelles Umis_glo, et Usat et Umis, étendu jusqu'aux échelles de 1 km. Les chiffres en gras correspondent aux cas les plus proches de la valeur idéale de 1.

		CCI v3.2 7j			CCI V3.2 30j		
		Usat	**Usat + Umis_glo**	**Usat + Umis**	**Usat**	**Usat + Umis_glo**	**Usat + Umis**
Global	2010-2020	1,122	1,019	**0,985**	1,506	1,103	**1,013**
	SMOS only	**0,968**	0,911	0,891	1,199	**0,994**	0,937
	SMOS Aquarius	1,118	**1,014**	0,980	1,557	1,127	**1,033**
	SMOS SMAP	1,159	1,045	**1,007**	1,547	1,108	**1,014**
Amazon	2010_2020	**1,066**	0,922	0,880	1,659	**0,973**	0,865
	SMOS only	**0,928**	0,845	0,832	1,382	**0,987**	0,902
	SMOS Aquarius	1,115	**0,951**	0,898	1,795	**0,999**	0,880
	SMOS SMAP	**1,064**	0,914	0,870	1,635	**0,947**	0,840
Agulhas	2010_2020	1,048	**0,967**	0,937	1,318	1,036	**0,963**
	SMOS only	**0,938**	0,879	0,858	1,173	**0,973**	0,909
	SMOS Aquarius	**0,961**	0,892	0,866	1,191	**0,958**	0,892
	SMOS SMAP	1,144	1,048	**1,015**	1,446	1,111	**1,030**
Pacific	2010_2020	**0,927**	0,895	0,883	**0,982**	0,913	0,887
	SMOS only	**0,725**	0,710	0,705	**0,759**	0,732	0,718
	SMOS Aquarius	**0,905**	0,872	0,859	**0,966**	0,890	0,864
	SMOS SMAP	**1,001**	0,966	0,952	1,055	**0,979**	0,953

J'ai mené les mêmes tests sur les champs CCI de version 4.4. Entre les versions 3 et 4 les distributions sont systématiquement plus piquées, signifiant soit que les différences non normalisées entre SSS CCI et *in situ* sont en moyenne plus petites, soit que l'incertitude liée à la mesure satellitaire est estimée plus forte. Les distributions obtenues avec la version 4 ont en général un écart type trop faible, inférieur à 1. Sur l'océan global, pour les données hebdomadaires, c'est particulièrement le cas de la période SMOS seul, où l'écart type obtenu est de 0.83. Sur la période Aquarius l'écart type est légèrement trop faible, à 0.93, et il est proche de 1 sur la période SMAP. L'écart type sur la période complète est lui aussi trop faible, en raison certainement de l'incertitude surévaluée des données SMOS. Les résultats sur les données mensuelles sont meilleurs, les distributions sont très proches de gaussiennes d'écart type égal à 1, à l'exception de la période SMOS seul où l'écart-type reste trop faible, à 0.88. On note également un biais négatif des données, qui peut être expliqué par la présence de RFIs importantes sur la période SMOS seul.

Sur la région de l'Amazone, comme pour la version 3, les écart-types sont systématiquement trop faibles, indiquant une surévaluation des incertitudes liées aux données satellitaires. On obtient, indépendamment de la période considérée, des écart types voisins de 0.90.

C'est le cas également des autres sous régions étudiées, où les écart types des différences réduites sont toujours trop faibles, et plus faibles qu'avec la version 3. Dans la région de la rétroflexion du courant des aiguilles c'est encore une fois sur la période SMOS seul que l'écart type est le plus éloigné de 1, il vaut 0.8. Sur la période SMAP cependant, les résultats du test sont bons avec un écart type de 0.99. Des résultats similaires sont obtenus avec les données mensuelles. Comme pour la version 3, sur la région du pacifique, très peu variable, l'apport de l'incertitude liée à la différence d'échantillonnage est très faible. Ici aussi les incertitudes liées aux mesures satellites semblent surévaluées : même sans prendre en compte Umis les écart types sont trop faibles, jusqu'à 0.6 pour la période SMOS seul.

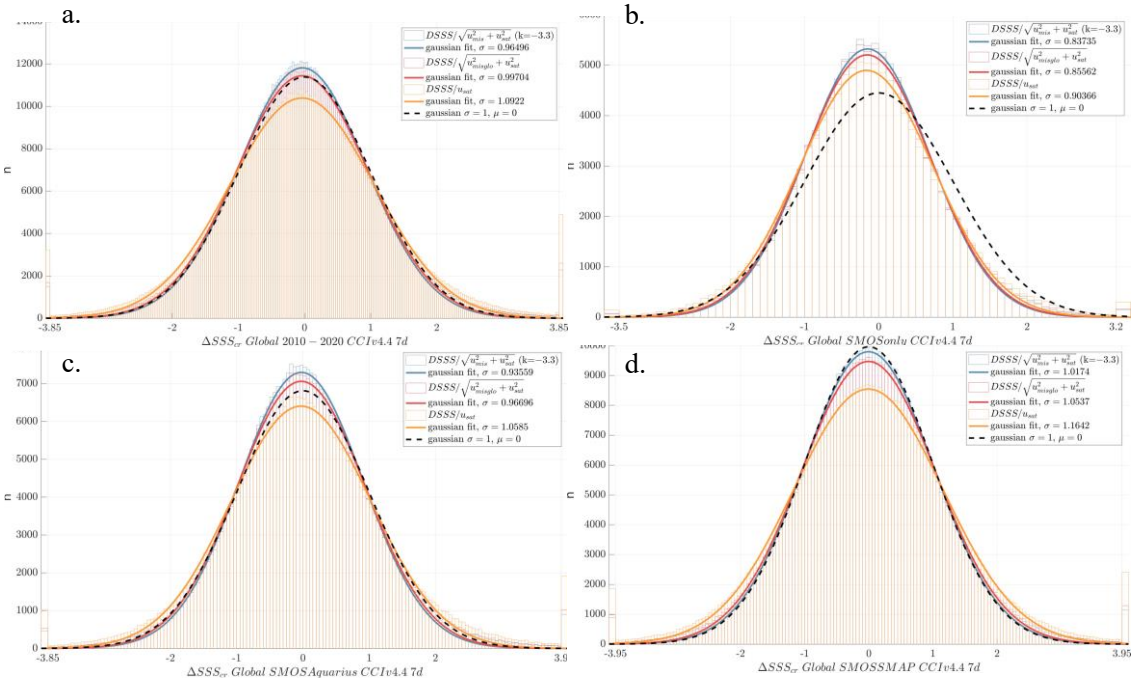


Figure III.9 : idem que Figure III.8 pour la version 4.4 des champs CCI.

Tableau 5 : idem que Tableau 4 pour la version 4.4 des champs CCI.

		CCI v4.4 7j			CCI V4.4 30j		
		Usat	**Usat + Umis_glo**	**Usat + Umis**	**Usat**	**Usat + Umis_glo**	**Usat + Umis**
Global	2010_2020	1,092	**0,997**	0,965	1,436	1,079	**0,996**
	SMOS only	**0,904**	0,856	0,837	1,096	**0,931**	0,881
	SMOS Aquarius	1,059	**0,967**	0,936	1,436	1,070	**0,987**
	SMOS SMAP	1,164	1,054	**1,017**	1,528	1,121	**1,030**
Amazon	2010_2020	1,079	**0,934**	0,889	1,658	**0,974**	0,870
	SMOS only	**1,003**	0,909	0,885	1,428	**1,027**	0,912
	SMOS Aquarius	1,092	**0,943**	0,884	1,769	**0,997**	0,880
	SMOS SMAP	1,089	**0,935**	0,898	1,639	**0,949**	0,853
Agulhas	2010_2020	**1,022**	0,945	0,917	1,269	**1,013**	0,944
	SMOS only	**0,882**	0,830	0,809	**1,082**	0,914	0,860
	SMOS Aquarius	**0,945**	0,879	0,854	1,168	**0,954**	0,891
	SMOS SMAP	1,120	1,028	**0,996**	1,385	1,083	**1,006**
Pacific	2010_2020	**0,885**	0,856	0,845	**0,937**	0,875	0,851
	SMOS only	**0,664**	0,650	0,646	**0,687**	0,662	0,651
	SMOS Aquarius	**0,836**	0,807	0,794	**0,893**	0,828	0,803
	SMOS SMAP	**0,996**	0,963	0,950	1,051	**0,978**	0,953

Les cartes des écart-types des distributions calculés dans des pixels de 2° permettent, comme dans la publication, de visualiser géographiquement les lieux où les écart-types sont particulièrement éloignés de 1. Les cartes pour les quatre périodes étudiées, avec les CCI v4.4 hebdomadaires sont présentées en Figure III.10. Pour les périodes 2010 – 2020, SMOS Aquarius et SMOS SMAP, les cartes obtenues sont similaires à ce qui est présenté dans la publication. Sur la période SMOS seul, on observe que les écart-types sont inférieurs à 1 sur à peu près toute la surface des océans. Ils sont particulièrement faibles dans l'océan austral.

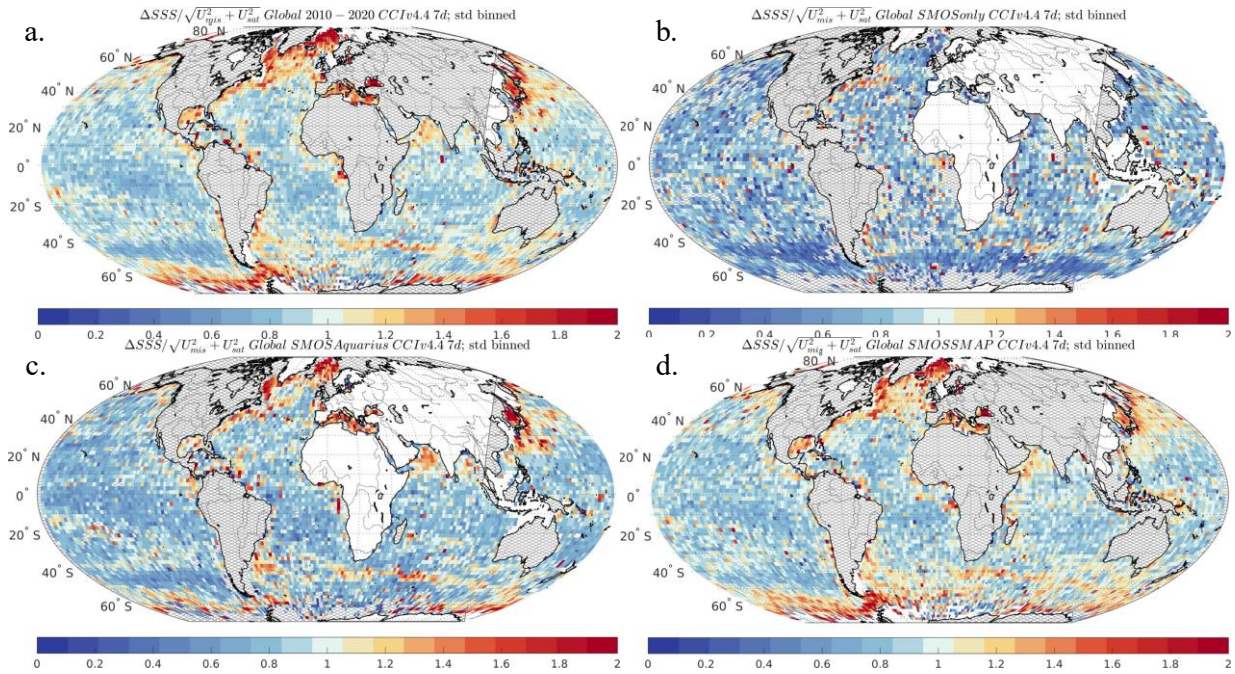


Figure III.10 : cartes des écart-types des distributions des différences SSS satellite - SSS argo réduites par la somme quadratique des incertitudes, dans des pixels de 2°, pour les périodes (a) 2010 - 2020, (b) SMOS seul, (c) SMOS Aquarius, (d) SMOS SMAP.

Ces études montrent que les erreurs sur les mesures satellitaires sont souvent surestimées, en particulier sur la période SMOS seul. Cette surestimation peut provenir de plusieurs facteurs dont certains sont en cours de modification dans le reprocessing SMOS prévu en 2024. Les incertitudes sur les données auxiliaires (température de surface et vitesse de vent) utilisées en entrée de l'inversion de la SSS ont été revues à la baisse, et les erreurs radiométriques SMOS ont été révisées. De plus l'interpolation optimale temporelle utilisée dans le processing CCI fait intervenir des champs de variabilité de la SSS dont certains pourraient être sous-estimés. Cela restera à approfondir dans de futures études. Enfin la méthode de validation utilisée fait l'hypothèse de distribution d'incertitude gaussienne qui n'est pas toujours le cas pour la variabilité de la SSS, comme je l'ai montré en section III.2.b.

6) Conclusion

J'ai mis en place une méthode de validation des SSS satellitaires et de leurs incertitudes tenant compte des erreurs de représentativité. Lors de ce travail, j'ai utilisé les simulations océaniques de haute résolution pour déterminer leur variabilité sous les échelles satellitaires. Cette variabilité a été utilisée pour estimer les erreurs de représentativité des données satellitaires, et pour mettre en place une nouvelle méthode de validation permettant de valider simultanément

la valeur de la SSS et la valeur des incertitudes associées à ces valeurs. Comme attendu, la variabilité de la salinité de surface est élevée dans les régions de fronts, de panaches de fleuves et dans les régions sujettes aux précipitations intenses. Une étude des distributions de la salinité à plusieurs échelles a permis de qualifier l'importance relative des différentes dimensions sur la variabilité, ainsi que la proximité des distributions d'une gaussienne. Les distributions ne sont en général pas gaussiennes, elles ont en particulier des queues de distributions plus étalées dans les régions variables. On a considéré dans une première approche de validation que les distributions étaient gaussiennes.

Les résultats des validations prenant en compte l'incertitude liée à l'échantillonnage montrent que les estimations des erreurs sont cohérentes à l'échelle globale, mais une surestimation des incertitudes sur la mesure satellitaire dans la région de l'Amazone. Ce résultat a été confirmé en utilisant les simulations APLUME36 fournies par Julien Jouanno à la place de GLORYS. Dans les régions peu variables, comme la région du pacifique étudiée, l'incertitude liée à l'échantillonnage a peu d'impact. Globalement, elle explique 33 % (15 %) de l'écart type des différences entre les SSS satellitaires mensuels (hebdomaires) et les SSS ponctuelles Argo. Une fois cet effet pris en compte, l'incertitude sur les SSS CCI satellitaire est estimée à 0.1 pour les champs mensuels et 0.14 pour les champs hebdomadaires.

Après la publication des résultats sur 3 ans, j'ai prolongé l'étude à la période satellitaire complète, ce qui permet d'étudier les incertitudes selon les instruments utilisés (SMOS, Aquarius ou SMAP). On observe une surestimation des incertitudes lorsque seul SMOS est utilisé, une légère surestimation lorsque SMOS et Aquarius sont combinés, et une bonne estimation sur la période où les données SMOS et SMAP sont disponibles. Cette méthode de validation devrait être intégrée dans les tests du PI-Mep (Guimbard et al. 2021), pour être mise en place de manière systématique lors des tests des différents jeux de données satellitaires. Dans le futur, il serait intéressant de poursuivre des études académiques sur l'impact de la non gaussianité de la variabilité naturelle de la SSS sur la variable centrée réduite.

IV. Intérêt d'une mission satellitaire haute résolution de type SMOS-HR/FRESCH pour l'échantillonnage de la variabilité de la SSS

1) Introduction

Dans cette partie, nous nous intéressons à la caractérisation de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles à l'aide d'une analyse spectrale des SSS simulées par des modèles océaniques. Cette étude a été faite en collaboration avec Jean-Luc Vergely de la société ACRI-ST. Elle s'inscrit dans ce travail de doctorat car elle permet de mieux qualifier la variabilité de la salinité, en particulier sous l'échantillonnage des mesures satellitaires actuelles.
Cette analyse complémente l'étude présentée en partie III : elle a pour but de caractériser la puissance des structures océaniques qui ont une signature en salinité, et en particulier le lien entre leurs échelles spatiale et temporelle. Le but est également d'optimiser la configuration instrumentale de futures missions satellitaires d'observation de la SSS pour qu'elles captent le maximum d'énergie, en adaptant au mieux la largeur de fauchée et le cycle satellitaire. Je n'aborderai pas dans cette section l'intérêt d'une mission satellitaire haute résolution pour s'approcher de la côte, mais me concentrerai uniquement sur la variabilité de la SSS dans des zones assez éloignées de la cote. Cette étude n'est pas finalisée et est encore sujette à développements.

Par le passé, plusieurs analyses spectrales ont été menées afin de mieux comprendre l'énergie des structures océaniques dans l'espace, entre la mésoéchelle et la sub-mésoéchelle. Callies and Ferrari (2013) ont utilisé des données *in situ* dans le Gulf Stream afin de calculer les spectres d'énergies potentielle et cinétique dans le domaine des longueurs d'onde. Ils montrent que les spectres sont très variables en fonction de la localisation géographique, et qu'ils suivent plusieurs régimes en fonctions des longueurs d'onde considérées : dans la région du Gulf Stream, les pentes de spectre sont cohérentes avec la théorie de la turbulence quasi géostrophique intérieure entre 200 km et 20 km, puis le spectre s'aplatit aux échelles plus fines, montrant la prédominence des ondes internes. Dans les régions subtropicales, les spectres ne sont pas en accord avec les théories quasi géostrophiques et la turbulence est expliquée par les marées internes jusque 100 km et par les ondes internes aux échelles inférieures.
De même, Kolodziejczyk et al. (2015) ont étudié les spectres de salinité, température et densité de l'océan à l'aide de données mesurées par les TSG des bateaux marchands. Ils se sont

intéressés en particulier à un transect traversant l'Atlantique nord emprunté régulièrement, ce qui permet d'observer la variation du spectre en fonction de la saison. Ils montrent que les spectres sont très variables saisonnièrement.

En hiver, des spectres de SSS et SST sont plus énergiques que le spectre de densité à cause de la compensation des effets thermohalins, associée à un mélange vertical. Au-dessus des longueurs d'onde de 100 km, les spectres de SSS et de SST ont une pente en k^{-1}, ce qui est attendu pour un traceur dans la théorie de la turbulence quasi géostrophique intérieure, puis un spectre en k^{-2} entre 100 km et 20 km, correspondant à des fronts marqués de température et de salinité, dont les effets se compensent en densité. En dessous de 20 km, les spectres obtenus ont des pentes en k^{-3}, cohérents ici aussi avec la théorie de la turbulence quasi géostrophique intérieure.

En été, les effets thermohalins se compensent moins, à cause du plus faible mélange de la couche de surface ; le spectre de densité est donc plus énergétique qu'en hiver. Le spectre de salinité est plus énergétique que le spectre de température, ce qui montre la plus grande importance de la salinité sur les fluctuations de densité. Pour les petites longueurs d'onde inférieures à 10 km, le spectre d'énergie est relié à des effets agéostrophiques, du fait d'une forte stratification qui isole la couche supérieure de l'océan de la dynamique intérieure.

Dans le domaine temporel, l'analyse spectrale est plus simple, car les différents phénomènes océaniques ont une signature temporelle marquée. On peut en particulier observer l'énergie des flux géostrophiques à des échelles supérieures à la fréquence inertielle, les oscillations d'inertie à la fréquence inertielle ; les marées sont visibles sous la forme de pics très fins à la fréquence qui les caractérise, puis l'énergie des ondes internes domine dans les fines échelles temporelles.

Sur d'autres variables, comme la hauteur dynamique, il est classique de faire des études simultanées de l'énergie dans les échelles temporelle et spatiale. C'est le cas par exemple de l'étude de Farrar and Durland (2012) qui se concentre sur la région très proche de l'équateur, et analyse le lien entre la puissance du spectre de hauteur dynamique et celle du spectre du vent, pour déterminer les modes de propagation des ondes et analyser les liens de cause à effet. Ils utilisent pour cela des réseaux de mouillages donnant des informations spatiotemporelles de l'océan pacifique.

À notre connaissance ce type d'analyse n'a pas été exploré pour l'étude des structures thermohalines. C'est ce que nous entreprenons ici, en nous intéressant à des simulations de haute résolution issues de modèles océaniques. Nous étudions séparément plusieurs saisons, et

nous focalisons sur quelques régions d'intérêt où la variabilité attendue est forte : le panache de l'Amazone, le Gulf Stream, le panache du Rio de la Plata et l'Atlantique subtropical (voir Figure IV.4). Nous ne nous sommes intéressés pour le moment qu'à la salinité de surface, le but premier étant d'aider au dimensionnement de futures missions satellitaires de mesure de la SSS. Cette étude pourrait être étendue à d'autres variables comme la température, permettant d'accéder à la densité et à l'énergie potentielle, à des fins de validation par rapport aux études citées plus haut.

Les quatre régions ont été choisies pour la diversité des propriétés des structures thermohalines attendues :

Le panache de l'Amazone et les fortes précipitations que l'on trouve dans la région produisent des gradients verticaux et horizontaux forts et peu profonds dans la partie supérieure de l'océan (Reverdin et al. 2007). A mésoéchelle, les structures thermohalines de surface sont principalement pilotées par l'instabilité barocline des courants situés au niveau des fronts, qui sont la principale source de tourbillons dans l'océan mondial. Les fronts de mésoéchelle contribuent à la cascade d'énergie vers la sub-mésoéchelles, de sorte que le mélange finit par diffuser le champ de densité horizontal et réduit le gradient de densité horizontal (Callies and Ferrari 2013).

Le Gulf Stream est un courant barocline puissant qui s'accompagne d'une inversion profonde du gradient de vorticité potentielle. Cela induit une instabilité barocline suivant le modèle de Phillips, et une forte activité tourbillonnaire à mésoéchelle (Hill et al. 2011)

Dans l'**Atlantique subtropical**, par contre, les gradients de vorticité potentielle intérieurs sont faibles. Un gradient de flottabilité de surface persiste cependant, on peut donc s'attendre à ce que les instabilités en surface et la dynamique des fronts en surface y jouent un rôle prépondérant. Klein and Lapeyre (2006) ont suggéré que la turbulence de surface-quasigeostrophique (Blumen 1978) pourrait permettre d'interpréter la turbulence de sous-mésoéchelle qui se développe en réponse à la génération de fronts.

Le panache du Rio de la Plata génère comme le panache de l'Amazone des gradients marqués verticaux et horizontaux à faible profondeur, les structures attendues dans cette région sont similaires à celles décrites plus haut pour l'Amazone. La différence entre les deux régions est le rayon de déformation, beaucoup plus large pour l'Amazone que pour le Rio de la Plata.

La méthode mise en place pour cette étude est décrite en section II.9).

2) Études spectrales de la SSS issue de la simulation APLUME36

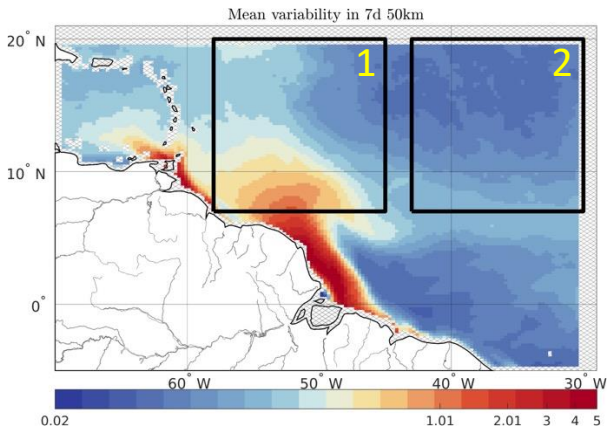


Figure IV.1 : région étudiée de la simulation APLUME36. Le fond de carte représente la variabilité de la SSS en pss, en échelle logarithmique. On s'intéresse ici à la boîte de gauche (boîte 1), située au niveau du panache de l'Amazone.

Je me suis tout d'abord concentré sur la région au large de l'Amazone (Figure IV.1) sur laquelle J. Jouanno a fourni des champs de SSS simulés avec le modèle APLUME36.
Le calcul du spectre de puissance 2D se réalise dans le plan (fr, ft), où fr représente la fréquence spatiale radiale et ft la fréquence temporelle. Afin d'améliorer la lisibilité des graphiques, ces fréquences sont converties en périodes exprimées en jours et en kilomètres.

La Figure IV.2 présente la puissance spectrale mesurée dans la boîte 1 de la Figure IV.1 pour deux périodes distinctes : la période s'étalant de janvier à mars (JFM) et celle de juillet à septembre (JAS), caractérisées respectivement par une faible et une forte variabilité. Entre ces deux périodes, on constate une augmentation significative de la puissance pour les fréquences temporelles élevées, dans une plage d'échelle spatiale d'environ 100 à 500 kilomètres.

On observe une variabilité importante à l'échelle de 2 à 3 jours particulièrement prononcée en JAS, et par contre relativement peu de puissance à de très petites échelles spatiales. Cette particularité est propre aux régions de basse latitude où le rayon de Rossby dépasse 100 kilomètres.
Cependant, des structures à sous-mésoéchelles telles que des filaments sont localement observées à l'aide de mesures *in situ* et qualitativement perceptibles grâce à des images couleur de l'eau. Ces structures, bien que de petite taille, jouent un rôle important dans le transport des masses d'eau (voir l'introduction de ce manuscrit).

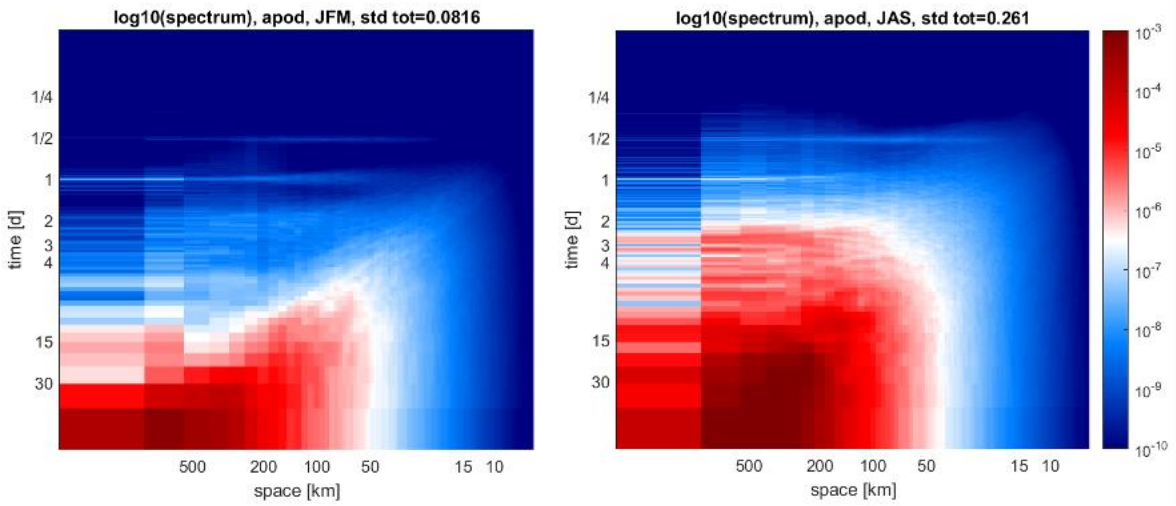


Figure IV.2 : spectres dans le plan (fr,ft) des SSS APLUME36, en Janvier Février Mars (gauche) et Juillet Août Septembre (droite).

Les spectres de puissance ci-dessus peuvent être intégrés soit selon la fréquence spatiale radiale (fr), soit selon la fréquence temporelle (ft), afin d'obtenir des spectres de puissance unidimensionnels (1D). La Figure IV.3 présentent ces spectres spatiaux et temporels.

En ce qui concerne les spectres de puissance spatiale, on observe une réduction de la puissance aux échelles spatiales très étendues, notamment aux échelles supérieures à 500 kilomètres durant la période de janvier à mars (JFM). Aux échelles plus petites, le spectre est légèrement supérieur à la loi en puissance de -3.2. Cette observation suggère que les petites échelles ne résultent pas uniquement de la fragmentation des grandes structures, mais qu'il existe une source qui contribue à leur génération. En revanche, pendant la période de juillet à septembre (JAS), la cascade d'échelles suit la loi en puissance de -3.2 de manière plus cohérente.

Les spectres temporels montrent clairement des pics à des intervalles de 6 heures, 8 heures, 12 heures et 24 heures pour la période JFM, tandis que pour la période JAS, on observe des pics à des intervalles de 6 heures, 12 heures, 24 heures et 3 jours. Ces pics peuvent être associés aux variations liées aux marées et, pour les fréquences les plus basses (3 jours), éventuellement à des influences périodiques dues aux vents.

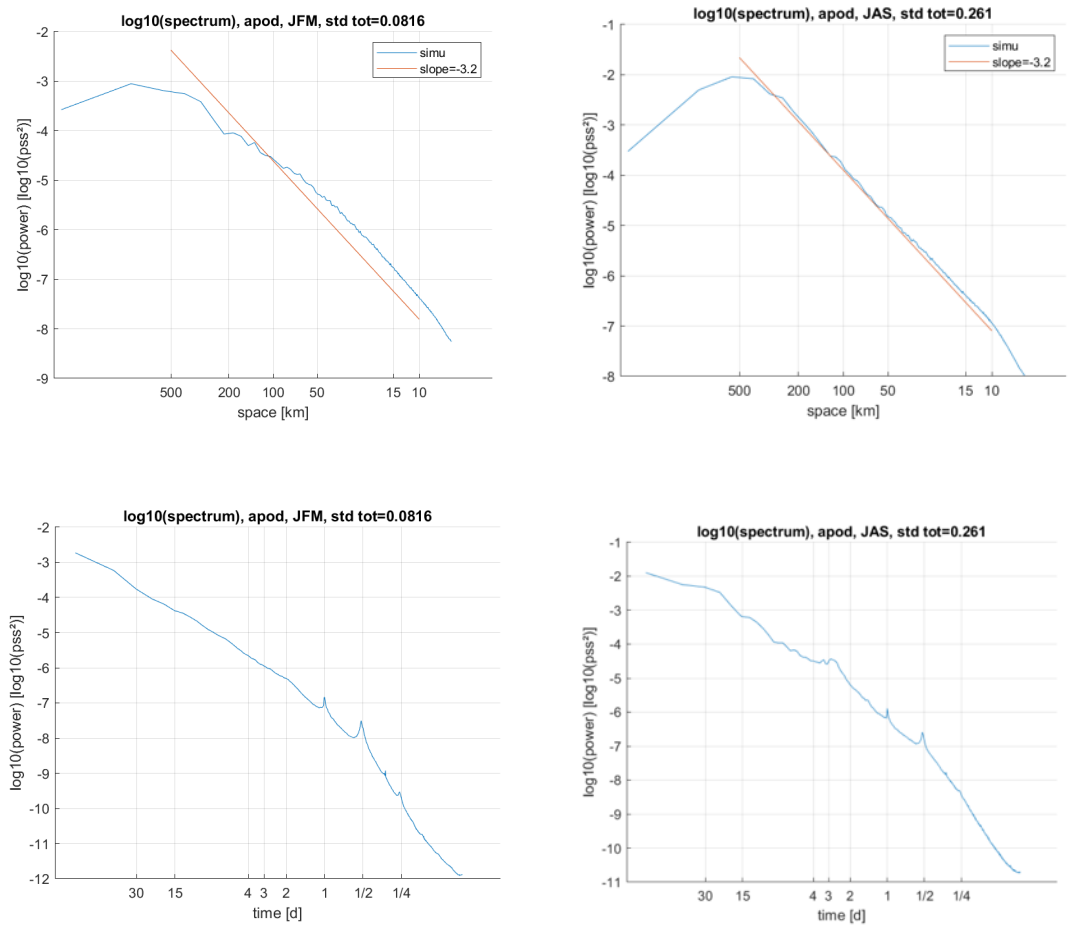


Figure IV.3 : Spectres dans l'espace (haut) et dans le temps (bas) des SSS APLUME36 pour Janvier à Mars (gauche) et Juillet à Septembre (droite).

3) Études spectrales de la SSS issue de la simulation GIGATL

La simulation GIGATL offre la possibilité d'atteindre des résolutions spatiales effectives plus élevées par rapport à la simulation APLUME36. De plus, elle englobe la totalité de l'Atlantique, ce qui permet d'explorer le comportement des structures de salinité à toutes les latitudes, en particulier aux latitudes intermédiaires où les champs de salinité présentent une plus grande densité de structures sous-mésoéchelle qu'à l'équateur. C'est donc cette simulation que nous avons sélectionnée pour évaluer l'impact de SMOS-HR sur des résolutions inférieures à 50 km, dans les régions décrites Figure IV.4.

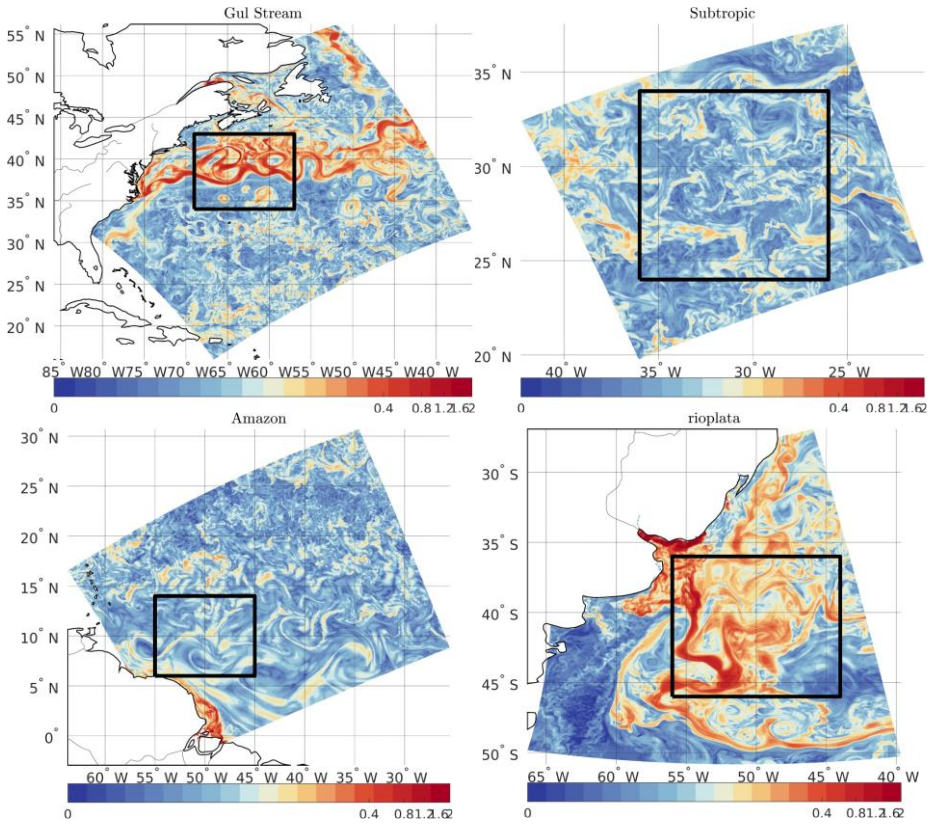


Figure IV.4 : région étudiée de la simulation GIGATL. Le fond de carte représente la variabilité de la SSS en pss, en échelles logarithmiques.

Les spectres bidimensionnels (fr, ft) pour les quatre régions couvertes par GIGATL ainsi que pour les saisons été et hiver sont exposés dans les figures suivantes.

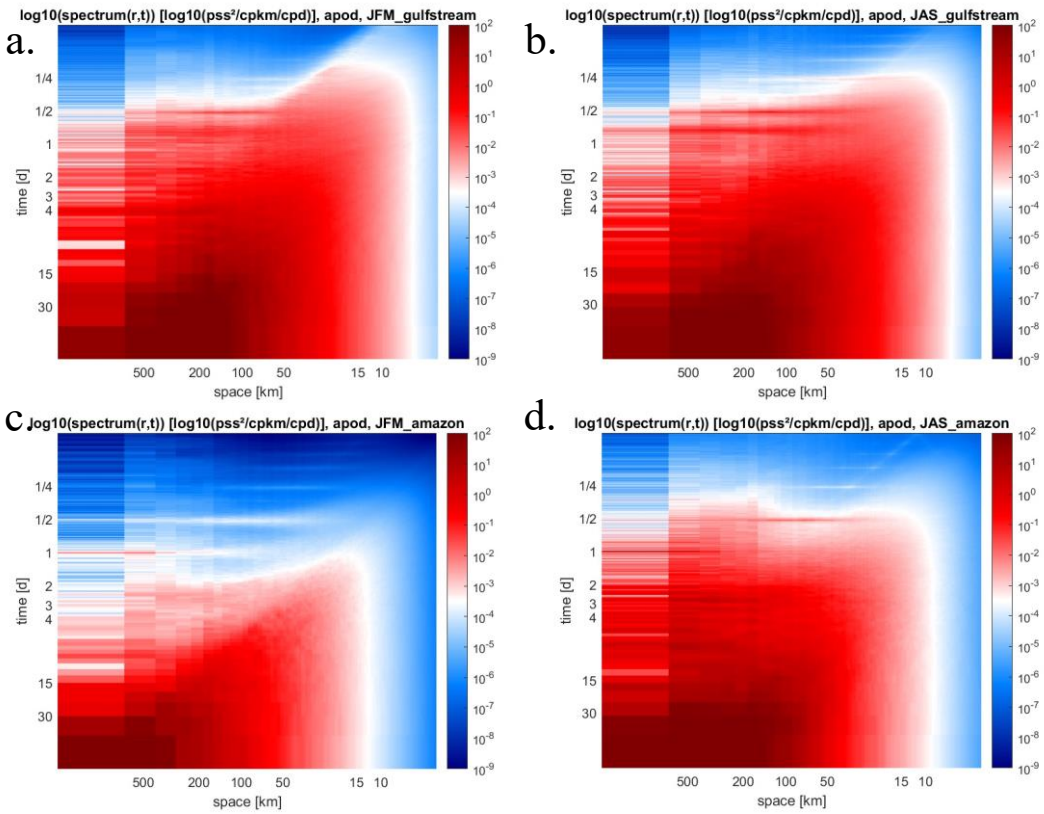
Concernant la région du Gulf Stream (Figure IV.5a,b), durant la saison hivernale, on observe des couches de mélange plus profondes et des fronts plus marqués. Cette configuration favorise une augmentation de l'énergie potentielle, ce qui se traduit par une plus grande puissance dans la sous-mésoéchelle, des ondes sub-inertielles, des instabilités baroclines au sein de la couche de mélange, ainsi que l'amplification d'ondes internes.

Dans la région du panache de l'Amazone (Figure IV.5c,d), on note une puissance faible en janvier à mars (JFM), un peu plus de puissance est observée en avril à juin (AMJ).

Dans la zone couvrant le Rio de La Plata (Figure IV.5e,f), qui englobe la zone de confluence, on observe une puissance importante aux échelles réduites, et il y a relativement peu de variation entre les saisons d'été (JAS) et d'hiver (JFM).

Au niveau de l'Atlantique subtropical (Figure IV.5g,h), on peut distinguer les périodes associées aux ondes d'inertie, notamment une période de 1 jour (leur période est d'approximativement 1 jour à 30° de latitude nord et de 0.8 jour aux latitudes du Gulf Stream).

Sur la diagonale des spectres bidimensionnels, on peut observer la relation de dispersion des ondes de Rossby.



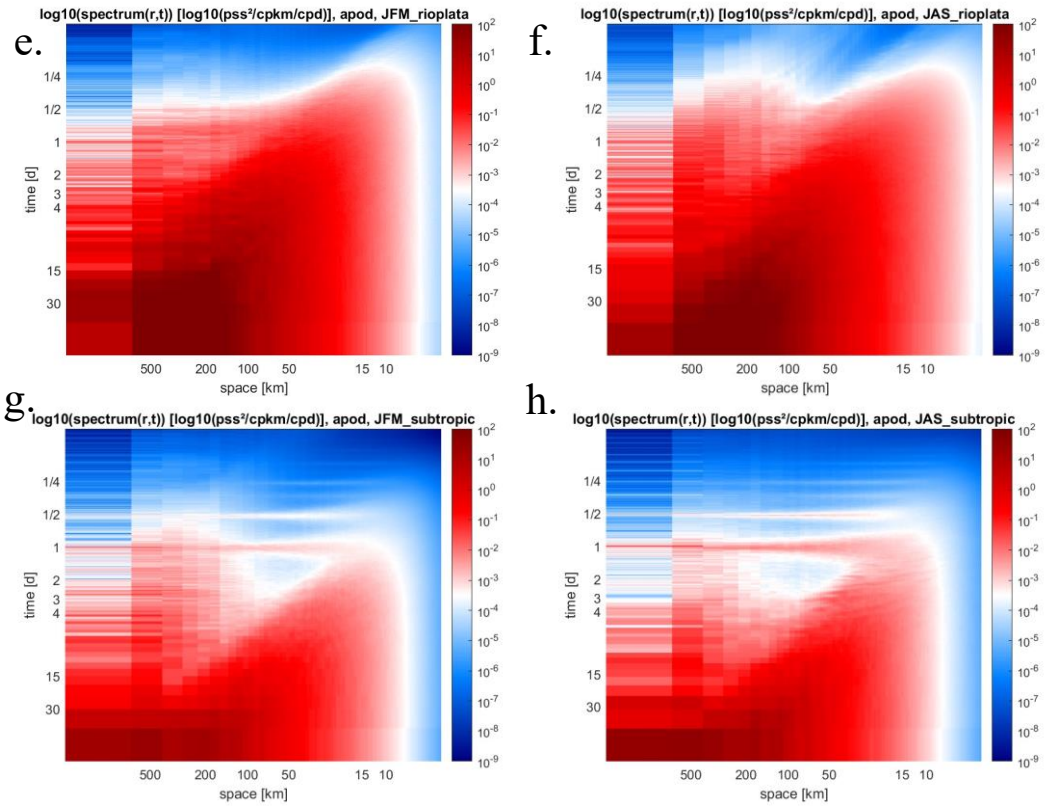


Figure IV.5 : spectres dans le plan (fr,ft). Gauche : Janvier Février Mars, droite : Juillet Août Septembre. (a, b) Gulf Stream, (c,d) Amazone, (e,f) rio de la Plata, (g,h) région sub tropicale. Les spectres (couleurs) sont en échelle logarithmique, ainsi que les axes.

Les spectres unidimensionnels (1D) sont représentés dans le plan (fr, puissance) et dans le plan (ft, puissance) dans la Figure IV.6. Ces spectres sont le résultat de l'intégration unidimensionnelle des spectres bidimensionnels présentés dans la section précédente.

Les pics d'intensité que l'on peut observer dans les spectres de fréquence temporelle correspondent aux marées et aux ondes inertielles.

On peut noter que la puissance présente dans les échelles spatiales réduites (15 km) des régions du Gulf Stream et de Rio De La Plata affiche des amplitudes très similaires, comparables à la puissance observée dans le panache de l'Amazone aux échelles d'environ 50 km, telles qu'elles peuvent actuellement être résolues par SMOS. Par conséquent, le rapport signal/bruit (SNR) du système SMOS-HR/FRESH étant attendu être du même ordre que celui de SMOS (mais pour des données à une résolution de ~10-15 km au lieu de 43 km pour SMOS), le système SMOS-HR/FRESH pourrait détecter des structures significatives à une échelle de 15 km dans les régions de bord ouest à moyenne latitude.

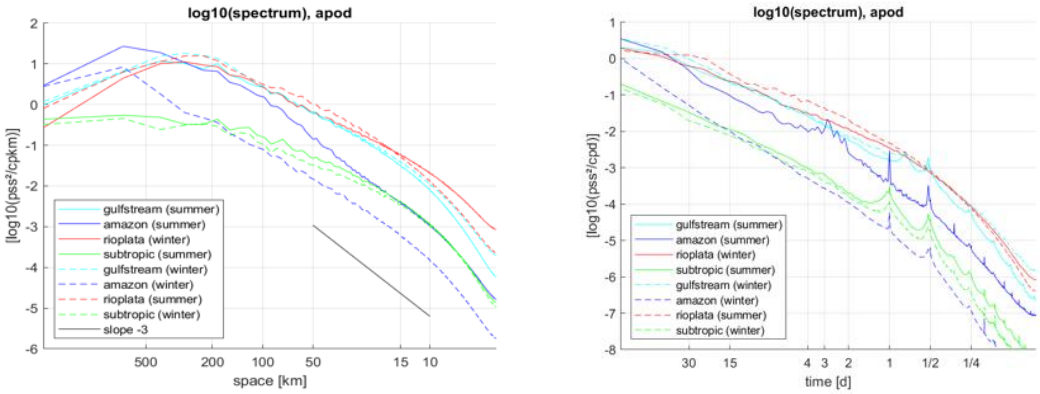


Figure IV.6 : Spectres dans l'espace (gauche) et dans le temps (droite), pour les différentes régions de la simulation GIGATL et les différentes saisons.

4) Conclusions

Les spectres obtenus dans la région de l'Amazone à l'aide de la simulation GIGATL sont en accord avec ceux obtenus dans la boîte 1 de la Figure IV.1 de la simulation réalisée par Julien Jouanno. La majeure partie de l'énergie des fluctuations se trouve principalement dans la mésoéchelle.

À des latitudes moyennes, telles que le Gulf Stream et Rio De La Plata, les spectres présentent une concentration significative de puissance à une échelle de 15 km, d'une magnitude similaire à ce qui est observé dans la région de l'Amazone à une échelle de 50 km. Dans ces régions, la contribution potentielle de SMOS-HR/FRESH à l'amélioration de la résolution est donc pertinente.

Le comportement des spectres varie considérablement d'une zone à l'autre. Des variations saisonnières marquées sont observées dans la région de l'Amazone, tandis qu'elles sont beaucoup moins prononcées ailleurs. La région de l'Atlantique subtropicale affiche la plus faible densité d'énergie. La puissance spectrale est importante à des fréquences temporelles allant jusqu'à un jour, soulignant l'importance pour un instrument résolvant 10-15 km d'avoir une large fauchée permettant d'atteindre des temps de revisite très courts, idéalement d'une journée à moyenne latitude.

V. Variabilité de la salinité dans la région Sénégal-Mauritanie : liens avec la variabilité des forçages de flux d'eau douce

1) Introduction

Après avoir caractérisé la variabilité spatiotemporelle de la salinité à partir d'indicateurs statistiques, je m'intéresse maintenant aux processus contrôlant la variabilité de la salinité à des échelles temporelles longues, allant de la saison à l'interannuel. Le but est ici d'étudier la cause de la variabilité de salinité, en particulier de s'intéresser au lien existant entre la variabilité de la salinité et la variabilité des différents forçages d'eau douce. On l'a vu en introduction, la salinité est un traceur idéal du cycle de l'eau. Sa répartition moyenne est fortement reliée à la répartition du terme évaporation – précipitation ; on observe également une salinité faible dans les régions de panaches de fleuves. Dans les modèles océaniques, par manque d'informations précises sur les flux des rivières, il est fréquent d'utiliser des forçages de débits de rivières climatologiques. C'est le cas par exemple de la réanalyse GLORYS. Récemment cependant, des estimations de débits interannuels ont été développées, permettant l'étude de l'impact de la variabilité de ces débits sur la couche de surface des océans. C'est à cet aspect que je m'intéresse ici, en cherchant à répondre à ces questions : comment l'océan réagit-il aux apports d'eau douce, et comment sa structure s'en trouve-t-elle modifiée ? Quelle est l'importance relative de la variabilité interannuelle des débits par rapport à une valeur climatologique ? Comment se compare l'impact des rivières par rapport au forçage atmosphérique ?

Pour répondre à ces questions, j'ai utilisé l'approche de la modélisation numérique. En collaboration avec Vincent Échevin du LOCEAN, nous avons mis en place des simulations produites par le modèle CROCO en utilisant diverses configurations de forçages, afin d'évaluer l'impact des variations climatologiques et interannuelles de débits de fleuves, et l'impact des précipitations. Nous avons également testé plusieurs produits de précipitations et de débits de fleuves, pour évaluer l'importance de la précision des forçages. Dans la mise en place de ces simulations, j'ai personnellement surtout contribué à la création des fichiers de forçages et à l'analyse des simulations.

Un des intérêts des simulations numériques est qu'elles permettent d'enregistrer les différents termes de l'équation de bilan de la salinité, et donc de séparer les contributions pour comprendre

l'impact des forçages sur la couche de mélange. C'est cette méthode qui a été utilisée dans cette étude qui fait l'objet d'un article en préparation. Je décris dans la section V.2) quelques études préliminaires permettant de relier dans une première approche la salinité de surface aux débits de fleuves. La version de la publication en préparation est insérée en section V.3). Des études complémentaires qui n'ont pas été développées dans l'article, concernant les profils verticaux de salinité, température ainsi que la stratification de l'océan supérieur, sont ajoutées à la suite.

2) Études préliminaires

Avant l'étude détaillée des simulations CROCO, je me suis intéressé à l'impact des débits des fleuves sur la salinité de surface en comparant les Hovmöllers de la SSS à la série temporelle des débits. La Figure V.1 montre des Hovmöllers de la salinité CROCO par bande de distance à la côte, ainsi que les anomalies de ces Hovmöllers par rapport à une climatologie calculée sur toute la période. On observe une forte variation saisonnière, avec une déssalure à la fin de l'année vers Décembre, plus tôt au sud de la région et de manière plus marquée qu'au nord.

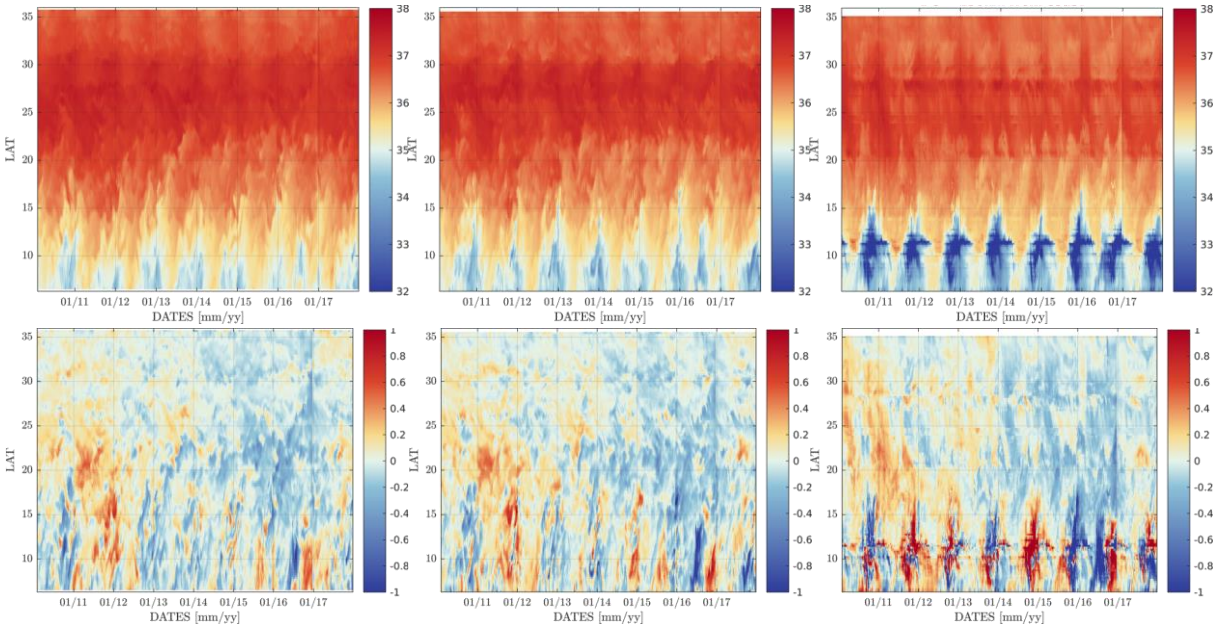


Figure V.1 : Hovmöllers de SSS (haut) et d'anomalies de SSS (bas), entre 300 et 500km des côtes (gauche), entre 150km et 300km (milieu) et à moins de 150km (droite). Figures données en pss.

Les run-offs issus de GloFAS varient également saisonnièrement, avec un pic d'intensité arrivant quelques mois plus tôt en septembre, comme on peut le voir sur la climatologie

et sur la série temporelle ci-dessous. Les anomalies de débit de fleuve sont représentées sur le panel bas de la Figure V.2, qui met en évidence des anomalies négatives en 2014 et positives en 2015 et 2016, anomalies qui sont également observées sur les hovmöllers ci-dessus, particulièrement proche de la côte. Il semble donc exister une corrélation, qui peut cependant aussi être liée à la pluie, qui engendre à la fois une déssalure sur l'océan et un débit important des fleuves lié aux précipitations sur terre.

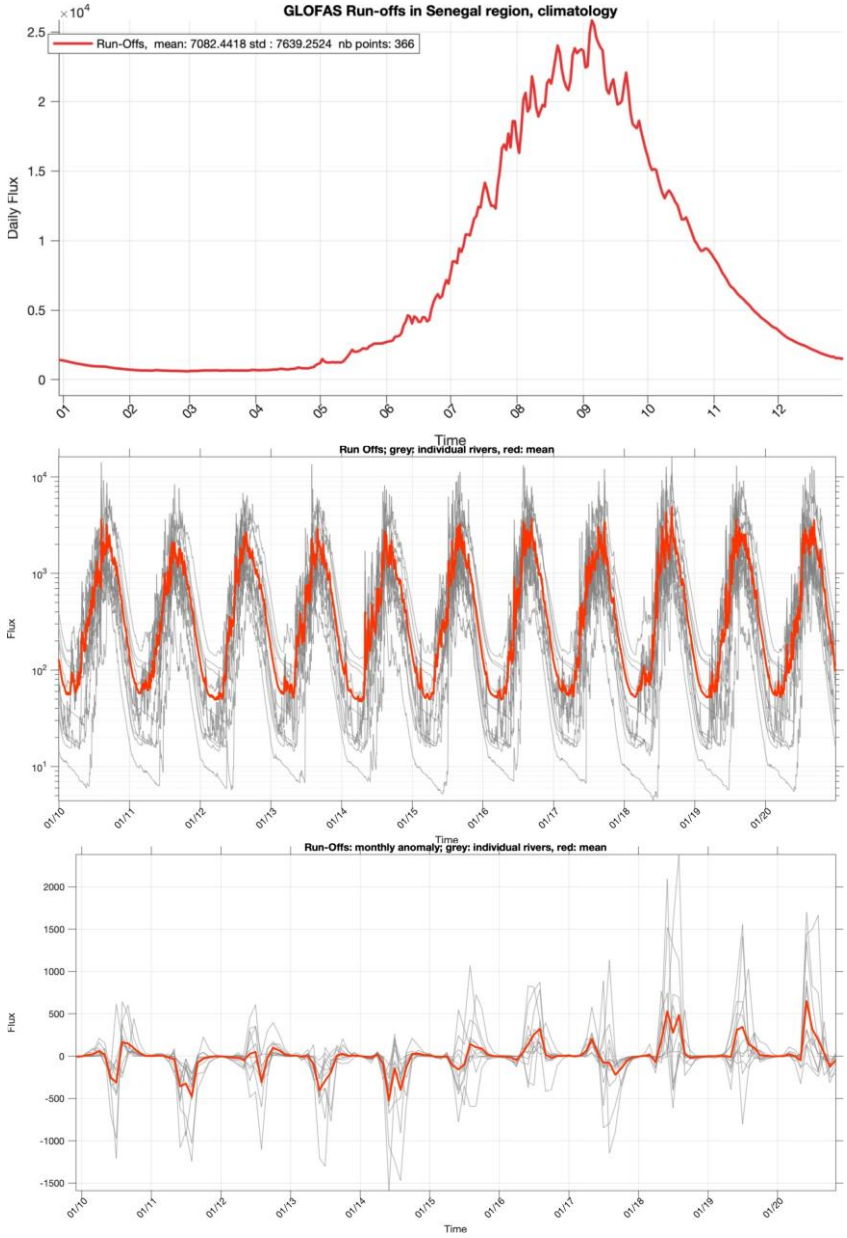


Figure V.2 : Run-offs des fleuves issus de GloFAS, en m³/jour : climatologie des run-offs moyens (haut) ; série temporelle des débits (gris : fleuves individuels, rouge : débit moyen) (milieu) ; anomalies mensuelles de débit (bas).

J'ai dans un premier temps cherché une cross-corrélation statistique entre les dessalures et les débits de fleuves. La méthode consiste à calculer des corrélations croisées avec un décalage en latitude et un décalage en temps. Nous avons fait cet exercice en se restreignant à la région de latitude inférieure à 15°N, région la plus sujette aux apports de flux d'eau douce, et par gammes de distance à la côte. Nous avons fait cet exercice avec les salinités satellitaires CCI et les salinités issues du modèle CROCO, la Figure V.3 résume le résultat de cette étude. On observe avec les CCI des anti-corrélations entre les débits et la salinité de surface, un fort débit d'eau douce entrainant une baisse de salinité. L'anti-corrélation atteint un maximum pour un décalage en temps de 53 jours et de ~5° vers le nord à moins de 150 km de la côte et de 78 jours et de ~9° vers le nord entre 150 km et 300 km. Avec le modèle CROCO, le résultat obtenu est similaire : un maximum d'anti-corrélation est atteint pour un décalage de 50 jours et 5° de latitude. Ce maximum arrive plus tard quand on s'éloigne de la côte, avec un décalage de 75 jours environ, et de 6° vers le Nord.

Ce résultat semble montrer une propagation vers le nord des dessalures issues des fleuves, et une corrélation forte entre les deux grandeurs. Ces valeurs donnent une vitesse de propagation moyenne des eaux dessalées d'environ 0.2 m/s.

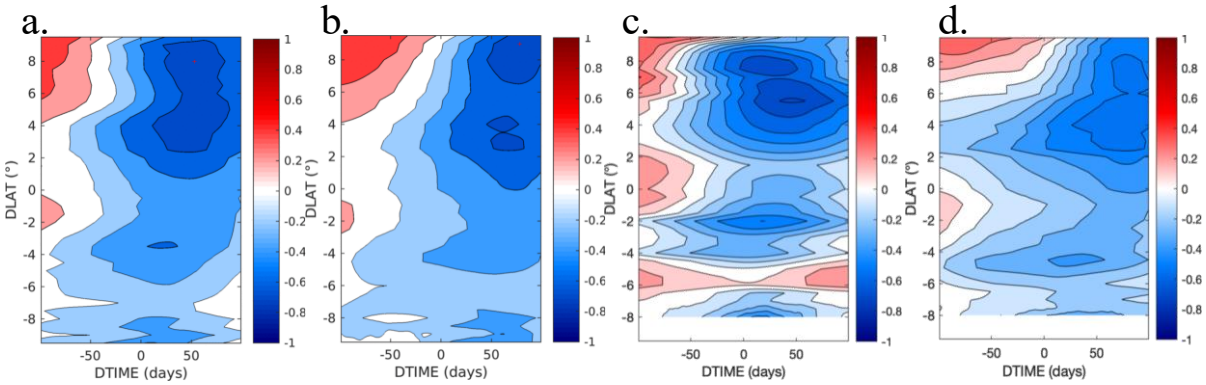


Figure V.3 : Corrélations entre les débits et les dessalures, en fonction d'un décalage en temps (abscisses) et d'un décalage en latitude (ordonnées) pour les CCI, entre 0 et 150 km de la côte (a.), entre 150 et 300 km (b.) ; et le modèle CROCO entre 0 et 150 km de la côte (c.), entre 150 et 300 km (d.).

Ces premiers résultats m'ont incité dans un premier temps à étudier plus en détail les liens entre les dessalures et les courants de surface. Je me suis en particulier employé à développer une méthode de maximum de cross-correlation qui n'a pas porté ses fruits, qui est décrite en Annexe 2.

Je me suis ensuite concentré sur le lien entre variabilité des flux d'eau douce et variabilité de la salinité, ce qui a abouti à la publication suivante, soumise en mars 2024 dans le journal Ocean Science. Cette étude se concentre sur la région e-SNTA au large de l'Afrique du Nord-Ouest ; en analysant des simulations régionales avec différents forçages d'eau douce et des données d'observation, on observe que les débits fluviaux influencent significativement la variabilité de la SSS, notamment après la saison des pluies. Ces résultats soulignent qu'une source importante d'incertitude pour représenter la variabilité de la SSS dans cette région provient des estimations des débits fluviaux.

3) Publication: Interannual variability of Sea Surface Salinity in North-Eastern Tropical Atlantic: influence of freshwater fluxes

Clovis Thouvenin-Masson[1], Jacqueline Boutin[1], Vincent Échevin[1], Alban Lazar[1], Jean-Luc Vergely [2]

[1] Sorbonne Université, LOCEAN-IPSL, CNRS/IRD/MNHN, Paris, France
[2]ACRI-st, Guillancourt, France

Correspondence to: Clovis Thouvenin-Masson (clovis.thouvenin-masson@locean.ipsl.fr) and Jacqueline Boutin (jb@locean.ipsl.fr)

Abstract:

In tropical regions, the fresh water flux entering the ocean originates primarily from precipitation and, to a lesser extent when considering basin scale averages, from continental rivers. Nevertheless, at regional scale, river flows can have a significant impact on the surface ocean dynamics. Riverine fresh water modifies salinity, and therefore density, stratification and circulation. With its particular coastline, relatively high cumulative river discharge, and the vicinity of Inter Tropical Convergence Zone (ITCZ), the eastern Southern North Tropical Atlantic (e-SNTA) region off Northwest Africa is a particularly interesting location to study the linkage between precipitations, river outflows and Sea Surface Salinity (SSS). Here we focus on the regional e-SNTA SSS seasonal cycle and interannual variability. We quantify the impact of river runoff and precipitation on SSS by means of regional simulations forced by different interannual and climatological river runoffs and precipitation products. The simulated SSS are compared with the Climate Change Initiative (CCI) SSS, *in situ* SSS from Argo, ships and a coastal mooring, and the GLORYS reanalysis SSS. The analysis of the salinity balance in the mixed layer is conducted to explore the dynamics influencing the SSS variability. Overall, the simulations reproduce well the seasonal cycle and interannual variability despite a positive mean model bias north of 15N. The seasonal cycle is impacted by the phasing of the different runoff products. The mixed layer SSS decrease during the rainy season is mainly driven by precipitation followed by runoff by means of horizontal advection and partly compensated by vertical mixing. In terms of interannual anomalies, river runoffs have a more direct impact on SSS than precipitation. This study highlights the importance of properly constraining river runoff and precipitation to simulate realistic SSS, and the importance of observing SSS in coastal regions to validate such constraints.

1 Introduction

The upper layer of the ocean is where exchanges between the ocean and the atmosphere take place. Forcings (e.g., wind, waves) generate turbulence and tend to create a mixed layer from a few meters to hundreds of meters thick, with homogeneous characteristics (e.g., temperature and salinity), and whose bottom is characterized by a marked density gradient, the pycnocline. This layer is where the various flows exogenous to the ocean take place such as precipitation, or river discharge. These water flows impact the ocean in different ways: they make the density of the surface waters to decrease, hence increase the gradient

between the surface and subsurface waters. Freshwater flows can generate significant salinity gradients within the mixed layer (Mignot et al. 2007), leading to the formation of intermediate layers known as barrier layers. The latter isolates the surface layer from the deep ocean, inhibiting heat exchange between the ocean surface and subsurface (Vialard and Delecluse 1998). Such ocean-atmosphere interactions make the mixed layer an ideal place to observe the water cycle, the generation of water masses and their evolution.

Since the 1980s, the quality and availability of *in situ* river discharge measurements have declined due to a lack of funding and to an unwillingness by states to share these data with the general public (Chandanpurkar et al. 2017, Durand et al. 2019). As a result, current Ocean General Circulation Model (OGCMs) such as used to generate Mercator's GLORYS reanalysis (Lellouche et al. 2021) typically utilize climatological river discharge products such as Dai et al. (2009), which have not been updated for more than a decade. However, it has been shown that river discharges tend to vary strongly interannually. Gévaudan et al. (2022) found that the Amazon River runoff anomalies can reach values of the order of 50 000 m^3s^{-1} (25 % of the climatological value) and that these anomalies have a significant influence on the salinity of the tropical Atlantic Ocean. Chandanpurkar et al. (2022) studied the influence of river discharge interannual variability on salinity at the mouths of the world's major rivers. They found that river discharge interannual variability is responsible for a standard deviation of 1.3 to 3 pss of salinity, and that models that take the interannual variation of river discharge into account simulate SSS that are closer to satellite observations. At the scale of the global ocean, a recent study (Fournier et al. 2023) demonstrates that SSS variability, averaged in estuarine regions of major river plumes, is strongly correlated with the global water cycle variability, particularly in relation to the ENSO phenomenon.

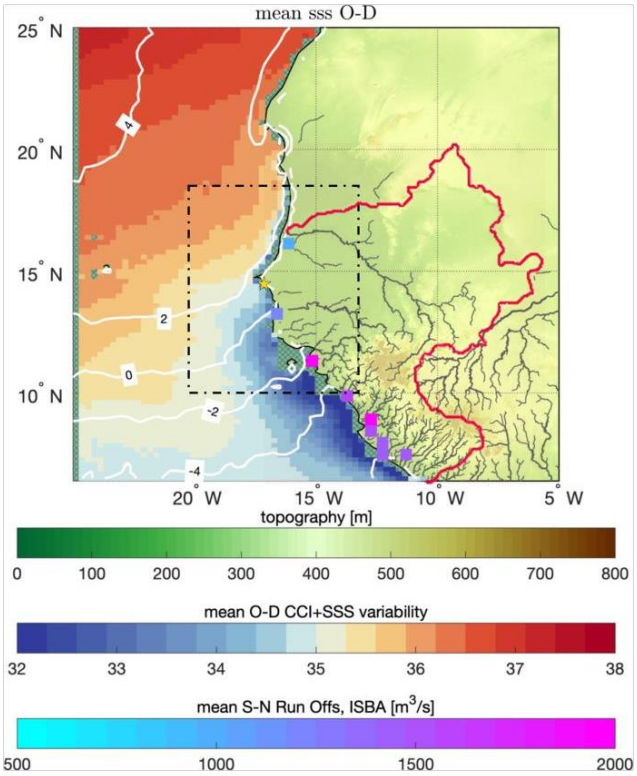
In this paper, we focus on the eastern Southern-North Tropical Atlantic region (e-SNTA, 10°N-17°N/20°W-12°W; Figure 1), a region highly subject to freshwater forcing. We analyze the origin of the observed SSS anomalies, and the importance of each forcing term on these anomalies. The North-West African region (Figure 1) is the site of significant river outflows, resulting from rainfall over the high mountain plateaus of Guinea. There is a geographical disparity in the river flows: to the north of Dakar (14.7°N), only the Senegal River has an average outflow of over 500 m^3s^{-1} (Roudier et al. 2014), whereas to the south of Dakar, freshwater discharge takes place via a multitude of rivers along the coast, the most important of which being the Gambia River. River flow in e-SNTA is highly seasonal with rivers running almost dry during the boreal summer and peaking in autumn after the rainy season. While their interannual variations are not well known due to a lack of data, studies based on climate models (Ardoin-Bardin et al. 2009) predict a long-term decreasing trend for these flows by up to 27 % for Senegal river and up to 37 % for Gambia river in 2080.

Cumulating all the rivers discharges of Senegal and Guinea [12°N-17°N] leads to an average monthly outflow of ~30 000 m^3s^{-1} at its annual maximum in September. In comparison, the largest Amazon outflow in May is 276 000 m^3s^{-1}, and the largest outflow of the Congo River is 56 000 m^3s^{-1} in December (Wohl and Lininger 2022). However, e-SNTA region is of particular interest because it is subject to both river discharge and intense precipitation linked to the meridional displacements of the InterTropical Convergence Zone (ITCZ). Furthermore, this region hosts the thriving Senegalese coastal upwelling, a region where human populations are highly dependent on small pelagic fisheries as a source of protein (Failler et al. 2014).

Concerning the impact of freshwater fluxes on salinity in e-SNTA region, only the seasonal variation has been studied by Camara et al. (2015) using the Nucleus for European Modelling of the Ocean (NEMO) ocean model. They found that runoffs and precipitations were the main contributors of the freshening in the e-SNTA, and that poleward advection of low salinity waters along the coasts was partly compensated by vertical diffusion of salinity.

In this context, the present study aims to complement the study by Camara et al. (2015) by quantifying the effect of interannual variation in forcings (e.g. runoffs) on surface and mixed-layer salinity in the e-SNTA. To this aim, the Coastal and Regional Ocean Community (CROCO) model is used and surface ocean dynamics are simulated using different configurations of climatological or interannual forcings. The model results are compared with Mercator's GLORYS reanalysis dataset, satellite and *in situ* SSS measurements (*e.g.*, merchant ships, Argo floats, buoys). The interannual variation in salinity in each configuration is estimated, as well as the SSS physical drivers using a mixed-layer salinity balance following Camara et al. (2015).

Sect. 2 presents the data, and the methods used. Sect. 3 is dedicated to the results and includes a validation of the modeled SSS, an analysis of the observed and modeled SSS anomalies and a study of modeled SSS sensitivity to changes in freshwater flux forcings. Finally, a few points are raised for discussion and conclusions in sect. 4.



3

Figure 1: satellite CCI SSS (color, in pss) averaged over October-November-December (over ocean); dashed white contours indicate the averaged ERA5 E-P (evaporation minus precipitation) rate (in mm/d) over this period. Topography (color scale, in meters) is shown on land. Along the coast, colored squares indicate averaged river outflows over September-October-November (color scale, in m^3/s). The area delimited by the red line corresponds to the merged catchment areas of the rivers flowing into the area of study, extracted from the HydroSHEDS database (Hydrological data and maps based on SHuttle Elevation Derivatives). Black dotted box delimits the e-SNTA region. The yellow star represents the position of Melax buoy, moored at 30 m depth, ~20 km from the coast.

2 Data & methods

2.1 The region of study: the Eastern-South North Tropical Atlantic (e-SNTA) [10°N 17°N, 20°W 5°W]

This region is identical to the one studied in Camara et al. (2015), for the purpose of comparing the results obtained. This region is strongly impacted by river water outflows, as it includes major rivers (Senegal, Gambia, Casamance, big and Little Scarcies; see Figure 1). In the following, we study the salinity and fresh water forcings variables averaged over this region.

2.2 SSS data

2.2.1 Satellite maps

Three L-band radiometric satellite missions have measured SSS from space: SMOS (2010-present), SMAP (2015-present), and Aquarius (2012-2015). The version 3.2 of the SSS product generated as part of the Climate Change Initiative project (CCI) is used here, covering a period from 2010 to 2021 (Boutin 2021). These data are generated with a temporal optimal interpolation of the three satellites measurements, as described for version 2 in Boutin et al. (2021). Developments between version 2 and version 3 are described in detail in Thouvenin-Masson et al. (2022). SSS fields are available on a 25 km Equal-Area Scalable Earth (EASE2) and they are used here at a weekly temporal resolution. Due to the spatial resolution of satellite SSS measurements, data taken at less than ~40 km from the coast are flagged as they must be considered with caution due to land contamination (e.g. (Zine et al. 2008). This flag filtering is applied in the present study. In this satellite product, a correction is applied to remove the instantaneous effect of rain on the top surface satellite measurements to remain consistent with bulk salinity recorded by most *in situ* instruments (Supply et al. 2020).

2.2.2 GLORYS reanalysis

The GLORYS12V1 product is a Copernicus Marine Environment Monitoring Service (CMEMS) global ocean eddy-resolving reanalysis available from 1993 to 2023. These reanalyses are based on the NEMO ocean model forced by ERA5 data and by climatological river runoffs at the surface. Satellite sea level anomalies, Sea Surface Temperature (SST), sea ice concentration, *in situ* temperature, and salinity vertical profiles (but not satellite SSS) are assimilated using a reduced-order

Kalman filter derived from a singular evolutive extended Kalman (SEEK) filter with a three-dimensional multivariate background error covariance matrix and a 7 day assimilation cycle (Lellouche et al. 2018, 2021). Model reanalysis output is available at daily temporal resolution on a regular 1/12° grid for 50 vertical levels. See Lellouche et al. (2021) for a complete description of the model.

2.2.3 Salinity *in situ* data

In situ data are used to evaluate the CROCO simulations. This involves thermosalinographs (TSG) installed on merchant and research vessels, measurements from Argo floats near the surface, and the Melax mooring measurements.

- **TSG**

The delayed mode data set from Laboratoire d'Etudes en Géophysique et Océanographie Spatiales (TSG-LEGOS-DM) is used. It is derived from voluntarily observing ships, collected, validated, archived and made freely available by the French Sea Surface Salinity Observation Service (Alory et al. 2015). Adjusted values, when available, and TSG data with quality flags = 1 and 2 ('good' or 'probably good') only are selected.

- **Argo profilers**

The Argo project is a set of about 4000 profilers moving in the global ocean. These instruments provide around 100 000 temperature and salinity measurements annually over the global ocean, and with an average spacing of 3 degrees between measurements (Argo 2023). These data are collected and made freely available by the international Argo project and the national programs that contribute to it. The Argo SSS data gathered in the Salinity-Pilot Exploitation Platform (Pi-Mep) database (Guimbard et al. 2021) is used. In this database Argo data from the Global Data Assembly Centre (GDAC) database (Argo 2023) with a quality index of 1 or 2 are selected. Argo measurements between 10 m and 0 m depth are considered as surface data (most of the Argo data resulting from this selection are taken at a depth of about 5 m).

- **Melax**

The Melax mooring is equipped with oceanographic and atmospheric sensors. Moored at 36 m depth, it is located at 30 km from the coast. It measures the physical and biogeochemical parameters over the Senegalese shelf [14°20' N,17°14' W], south of the city of Dakar (Tall et al. 2021). The mooring captured surface salinity almost continuously from mid-February 2015 to august 2016.

2.2.4 Regional simulations: the CROCO model

The ocean model CROCO (https://www.CROCO-ocean.org/;(Hilt et al. 2020) is used to simulate salinity variations in the e-SNTA region. CROCO has vertical sigma coordinates, which are well suited for coastal studies. The slow baroclinic mode and the fast barotropic mode are computed separately (Shchepetkin and McWilliams 2009), improving the consistency, accuracy, and stability of the simulations. High-order numerical schemes enable the representation of small-scale structures such as mesoscale eddies and filaments. The AGRIF (adaptive refinement of the horizontal grid ; (Debreu et al. 2008) module is utilized, enabling the embedment of a sub-domain in which small-scales are more finely resolved. In the configuration used here, the parent grid covering [7°N-35°N; 30°W-10°W] has a resolution of 10 km, and the child grid used in the Senegal region [12°N-18°N; 20°W-15°W] has a resolution of 2 km. More details on the model configuration can be found in Ndoye et al. (2018). Daily outputs from the MERCATOR model output at 1/12° resolution (GLOBAL-ANALYSISFORECAST-PHY-001-024; downloaded from http://marine.copernicus.eu/) are used to force physical properties (temperature, salinity, velocity and sea level) at the open boundary conditions (OBC) of the parent grid.

Hourly atmospheric forcings (air temperature, relative humidity, 10 m wind, radiative fluxes) from the ERA5 reanalysis (see below) are used in all simulations. In the present study, the model was run with two different precipitation datasets and two different river runoff products, which are detailed in the following. No surface salinity restoring to climatological observations (*e.g.*, Ndoye et al. (2018)) was used.

2.2.5 Precipitation forcings

- **ERA-5**

ERA5 is a reanalysis produced by the European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF), which provides comprehensive modeling of atmospheric, continental surface and ocean wave variables (Hersbach et al. 2020). Based on the Cycle 41r2 Integrated Forecast System (IFS), ERA5 hourly fields have a horizontal resolution of 31 km over the period 1950-2023.

The precipitation value used in the CROCO simulations is composed of the convective precipitation field (cp) produced by the IFS convection scheme, which represents precipitation at sub-grid scales, and the stratiform precipitation field (sp) produced by the IFS cloud model, which represents the formation and dissipation of clouds and large-scale precipitation due to changes in atmospheric variables such as pressure, temperature and humidity.

- **IMERG**

Integrated Multi-satellitE Retrievals for Global Precipitation Measurement (IMERG) is a rain rate product based on satellite precipitation measurements. It combines information from the Global Precipitation Measurement (GPM) satellite constellation

with infrared (IR) satellite data taken by geostationary satellites to estimate precipitation over the majority of the Earth's surface at a frequency of 30 minutes. The algorithm is based on the Climate Prediction Center Morphing (CMORPH; (Joyce et al. 2004) method, and takes advantage of the high repetition rate of IR satellites to track the movement of less frequent but more accurate microwave and radar-detected rainfall cells.

Over the ocean, these two precipitation products are consistent in terms of mean values and have similar climatologies and anomalies (Figure 5c, Appendix B), after integration over the e-SNTA. Nevertheless, IMERG rain rates are more variable locally and extend over a larger range of values than ERA5 rain rates (see Appendix A, Fig. A.1 and A.3).

2.2.6 Runoffs forcings

River discharges estimated by the GloFAS and ISBA-CTRIP models are used to force CROCO. The characteristics of the forcings are listed below:

- GloFAS

[illegible] (Harrigan et al. 2020) is one of the components of the Copernicus Emergency Management Service (CEMS). This system is designed to help prevent flooding on a global scale, notably by providing water level forecasts for river basins. It is based on satellite data, on soil temperature and humidity, on precipitation from ERA5, and on *in situ* data. These data are integrated into the Hydrology in the Tiled ECMWF Scheme for Surface Exchanges over Land (HTESSEL) continental surface model, which is part of the ECMWF's integrated forecasting system (IFS 41r2) via a terrestrial data assimilation system explained in de Rosnay et al. (2012). The resulting runoff is then integrated into the LISFLOOD runoff routing model.

- ISBA-CTRIP

ISBA-CTRIP river discharge estimation is used in this study. ISBA-CTRIP combines two models: the Interaction Soil-Biosphere-Atmosphere (ISBA; https://www.umr-cnrm.fr/isbadoc/model.html) hydrological model developed by the Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM) within the framework of the IPCC (see Decharme et al. (2019) for a full description of the model) and the CTRIP (CNRM version of Total Runoffs Integrating Pathway) model, which is an improved version of the TRIP model used to simulate river runoff to the ocean from the total runoff calculated by ISBA. In the configuration used here this model uses Tier-2 Water Resources Re-analysis precipitation at 0.25° resolution (WRR2) from the E2O project as forcing. The E2O data set is directly based on the 3-hourly ERA-Interim reanalysis (https://www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/reanalysis-datasets/era-interim) over the 1979-2014 period. Precipitations have been hybridized with observations using the Multi-Source Weighted-Ensemble Precipitation (MSWEP; http://www.gloh2o.org) data set (Beck et al. 2017).

GloFAS and ISBA runoffs, after summing the individual outflows for the region studied, have similar climatologies (maximum difference of 1.10^8 m^3/d, see Appendix B). The simulated river runoffs exhibit strong interannual anomalies in this area (Fig. 5c). These river runoff anomalies are highly correlated with monsoon anomalies (Fig. 8) and can reach 11 000 m^3s^{-1}, i.e., almost 30 % of the seasonal variation (Appendix B). These interannual anomalies (see sect. 3.3 below) are sometimes of opposite signs between the two products, with differences reaching 12.10^8 m^3/d (Figure 5c). These differences and their origins are discussed in section 4.

2.3 Characteristics of the CROCO simulations

In order to estimate the relative importance of interannual variations in each of the freshwater fluxes forcings, five CROCO simulations are performed with different rain rate and river runoffs forcings. The other hourly forcing terms (air temperature, wind, radiative flux, etc.) are kept identical for all simulations. Three simulations are forced with synoptic freshwater flux forcings, including interannual variations. These simulations are called CROCOglofas, CROCOisba and CROCOimerg. Two simulations are forced with climatological rain rates or climatological river outflows respectively. They are named CROCOprclm and CROCOroclm. The forcings of each simulation are summarized in Table 1.

Table 1: list of simulations studied and their freshwater flux forcings.

Name	Precipitation	River discharge
Interannual simulations		
CROCOglofas	ERA5 hourly	GloFAS daily
CROCOisba	ERA5 hourly	ISBA daily
CROCOimerg	IMERG hourly	ISBA daily
Climatological simulations		
CROCOroclm	ERA5 hourly	GloFAS climatology
CROCOprclm	IMERG climatology	ISBA daily

2.4 Analysis of the processes controlling the mixed-layer salinity budget

Diagnostics implemented in CROCO make it possible to isolate the various terms involved in the salinity balance of the mixed layer in order to identify the dynamical processes that modify salinity. In CROCO, the temporal variation of the salinity, $\partial_t S$, is expressed as follows, for each layer of the water column:

$$\partial_t S = -\partial_x(uS) - \partial_y(vS) - \partial_z(wS) + \partial_z(K_z\,\partial_z S) \quad (1)$$

With t the time dimension, x, y, z the zonal, meridional and vertical dimensions respectively, u, v, w the current on the x, y, and z dimensions respectively, S the salinity, K_z the vertical diffusion coefficient.

The boundary conditions on salinity fluxes are:

- At surface $(z = 0)$: $K_z\,\partial_z S = SSS(E - P)/\rho_0$
- At ocean bottom $(z = -H)$: $K_z\,\partial_z S = 0$ (no exchanges through the bottom)

Over the mixed layer of height (h), the salinity budget is computed as follows:

$$(1/h)\cdot\int_{-h}^{0}(\partial_t S)\cdot dz = (1/h)\cdot\int_{-h}^{0}\left(-\partial_x(uS) - \partial_y(vS) - \partial_z(wS) + \partial_z(K_z\,\partial_z S)\right)\cdot dz \quad (2)$$

Note S_m the depth-averaged salinity in the mixed layer: $S_m = = 1/\mathrm{h}.\int_{-h}^{0} S dz$

The left-hand side can be expressed as the sum of the time variation of S_m and the entrainment term:

$$(1/h)\cdot\int_{-h}^{0}(\partial_t S)\cdot dz = \partial_\mathrm{t}\left((1/\mathrm{h})\cdot\int_{-h}^{0}\mathrm{S}\cdot dz\right) + \partial_\mathrm{t}\mathrm{h}/\mathrm{h}\cdot\left(1/h\int_{-h}^{0}\mathrm{S}\cdot dz - \mathrm{S}(-h)\right)$$

$$\partial_t S_m + \partial_t h/h\big(S_m - S(-h)\big)/h = -(1/h).\int_{-h}^{0} -\partial_x(uS)dz - (1/h)\int_{-h}^{0}\partial_y(vS)dz$$

$$-(1/h)\int_{-h}^{0}\partial_z(wS)dz + (1/h)\cdot\int_{-h}^{0}\partial_z(K_z\,\partial_z S).\,dz \quad (3)$$

The last term (related to vertical diffusion) is equal to:

$$(1/h)\int_{-h}^{0}\partial_z(K_z\,\partial_z S)\cdot dz = (1/h)\cdot[K_z\,\partial_z S]_{-h}^{0} = (1/h)\cdot SSS(E - P)/\rho_0 - (1/h)[K_z\,\partial_z S]_{-h} \quad (4)$$

CROCO computes online (for each time step) S_m and $\partial_t S$, so it can compute the entrainment term as a residual:

$$\partial_t h/h\cdot\left(1/h\int_{-h}^{0}Sdz - S(-h)\right) = (1/h)\cdot\int_{-h}^{0}(\partial_t S)\cdot dz - \partial_t\left((1/h)\cdot\int_{-h}^{0}Sdz\right) \quad (5)$$

Thus, the final equation is:

$$\underbrace{\partial_t S_m}_{rate} = -\underbrace{(1/h)\cdot\int_{-h}^{0} -\partial_x(uS)dz}_{zonal\ advection} - \underbrace{(1/h)\cdot\int_{-h}^{0}\partial_y(vS)dz}_{\text{meridional advection}} - \underbrace{(1/h)\cdot\int_{-h}^{0}\partial_z(wS)dz}_{vertical\ advection}$$
$$+\underbrace{(1/h)\cdot SSS(E-P)/\rho_0}_{forcing} - \underbrace{(1/h)[K_z\,\partial_z S]_{-h}}_{vertical\ mixing} - \underbrace{\partial_t h\big(S_m - S(-h)\big)/h}_{entrainment} \quad (6)$$

In this study, the mixing terms were found to be negligible compared to the other terms, and the horizontal and vertical advection terms were found to largely offset each other. Thus, in the following, the so-called advection term comprises the sum of the zonal, meridional and vertical advection terms. The runoff forcing is introduced via the zonal advection term $-\partial_x(uS)$ as rivers are introduced as westward zonal flows at different locations of the west african coastline.

2.5 Comparison between SSS datasets and model variables

2.5.1 Calculation of lag-correlations

In the following the spatial averages of the different variables linked to the salinity budget over the e-SNTA, and their relationships with each other are studied. We correlate forcing terms with salinities or other terms (such as wind intensity or MLD) using the determination coefficient (r^2). In order to identify cause-and-effect relationships that can take weeks to establish, the correlation maximum by allowing a time delay (up to ±90 days) between the variables is used.

2.5.2 Comparison between SSS datasets

- **Colocation method between gridded SSS and Melax mooring or Argo floats SSS**

A spatial bilinear interpolation of the gridded product and a selection of the nearest neighbor in time are used to collocate products represented on a grid with local data from Argo floats or Melax buoy.

- **Colocation method between gridded SSS and TSG SSS**

Given the high spatio-temporal sampling of TSG measurements, we smooth them with a gaussian window along the ship track to a resolution comparable to gridded datasets (e.g., model or satellite data type). The standard deviation of this filter is set to one quarter of the spatial resolution of the model grid (95 % of the weight in a radius of half the spatial resolution). The resulting smoothed TSG data are compared to the nearest corresponding satellite or model pixel in time.

Only the SSS in pixels that are common to modeled and satellite SSS are considered when comparing results obtained with both datasets.

2.6 Climatological and interannual variability of the salinity budget

The different variables linked to salinity budget are spatially averaged over the e-SNTA, and the resulting time series are analyzed from January 2010 to July 2019, which is the time period over which ISBA runoff was available at the time of this study. The averaged seasonal and interannual signals are then extracted from the original signal, as follows:

- Seasonal signal: a two-stage method is used to calculate a climatological seasonal variation. A daily climatology is first calculated by averaging data available on each day of the year between 2010 and 2019 (Figure 2). To eliminate short-term fluctuations, the daily climatology is then smoothed using a 1-month moving-average filter.

- Interannual signal: To remove the seasonal variations, the monthly climatology is subtracted from the original daily time series. A 3-month moving average is then applied to filter intraseasonal variability in order to focus on interannual variability at seasonal time scales.

3. Results

3.1 Analysis and validation of the seasonal cycle of salinity

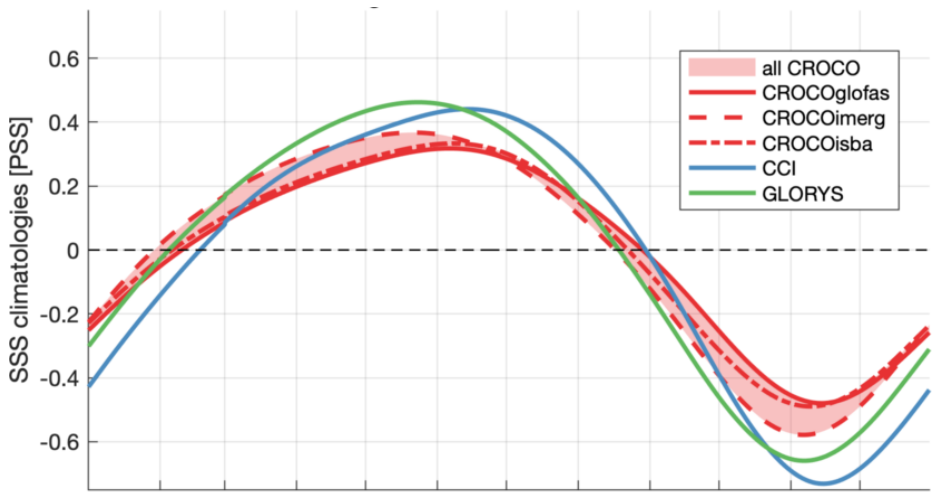


Figure 2: Seasonal cycle of SSS in the e-SNTA region: CCI (blue), GLORYS (green) and various CROCO simulations. The red area represents the range between the minimum and maximum value of the simulated SSS.

A study of the salinity balance resulting from the different CROCO simulations (see appendix B) was carried out in order to analyze the dynamical processes at the origin of the SSS seasonal cycle. The SSS climatological variations are governed by the effect of precipitation during the summer rainy season. Rainfall accumulates on the continent during this

period, generating intense river runoff 1-2 months later. The peak of river runoff is reached in September-October. This drives a continuous drop in salinity from the start of the rainy season onwards. These two effects also generate a strong vertical salinity gradient at the base of the mixed layer, and a decrease of the MLD. The ocean attenuates this freshwater flow through vertical advection (not shown) and entrainment of relatively fresh water towards the ocean interior. During the dry season (January-May), the atmospheric forcing is slightly positive (due to evaporation being larger than precipitation) and associated with a thinner mixed layer. There is also a strong vertical inflow of salt in the mixed layer by advection (not shown), which corresponds to the coastal upwelling particularly marked in March. Relatively salty upwelled waters are then redistributed by horizontal advection, notably by westward Ekman transport. This analysis is in line with Camara et al. (2015).

Although similar in shape and of the same order of magnitude, the seasonal cycles shown in Figure 2 present notable differences: CROCO SSS have a seasonal cycle of smaller amplitude than that of CCI and GLORYS, and CCI SSS is in phase with CROCOglofas. On the other hand, CCI SSS lags CROCO SSS when forced by ISBA runoffs (CROCOimerg and CROCOisba) and GLORYS SSS by ~2 weeks. Between the CROCO simulations, there is a difference of the order of 0.1 pss in amplitude, which may stem from a difference in the amplitude of the seasonal cycle of the precipitation products that were used, the amplitude of IMERG seasonal cycle being 3.10^8 m^3/day larger than the one of ERA5 (Appendix B, Fig. B.1.b).

3.2 Evaluation of the CROCO simulations using *in situ* measurements

3.2.1 Coastal SSS from the Melax mooring off southern Senegal

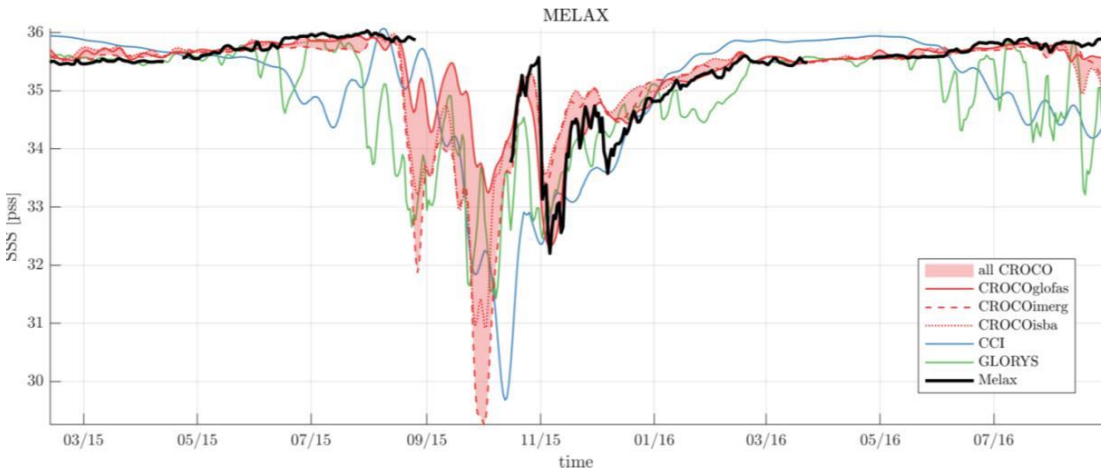


Figure 3: Surface salinity from the Melax mooring (black line) between March 2015 and August 2016. The CROCO simulations are marked by red lines. Red shading shows the range between the maximum and minimum simulated values. Satellite data is shown in blue, GLORYS data is shown in green. Both time series are collocated at the Melax mooring. Notice that the nearest satellite data pixel is further than 30 km apart from the mooring position and further than 50 km apart from the coast.

Salinity measurements at the Melax mooring provide a useful time series for the evaluation of the simulation near the Senegalese coast. During its first two years of deployment, the mooring recorded an almost continuous time serie, with a SSS oscillation of ~2-3 pss amplitude in November 2015 (Figure 3). CROCO SSS agree well with *in situ* SSS, during the dry seasons (March-September 2015 and March-July 2016) and at the time of the very strong oscillation in November. GLORYS also gives consistent results, but underestimates the amplitude of the first observed oscillation of SSS (Mid October – early November 2015). GLORYS SSS is also highly oscillatory and too low over the periods when *in situ* SSS is stable (before September 2015 and after May 2016). The CCI SSS is further from *in situ* SSS, which is expected as the pixel collocated with the mooring is 30 km offshore of the mooring (and 55 km from coast), due to the application of the coastal flag and the land contamination close to the coast. In addition, in such a coastal area with unresolved satellite SSS variability, an error arises from the sampling difference between a pointwise *in situ* measurements and a satellite measurement integrated over ~50km (Thouvenin-Masson, et al. 2022), which is greater than the GLORYS and CROCO horizontal resolutions.

The salinity balance is used to explain the origin of the strong oscillation detected in mid-2015 (see Appendix C). Freshening is initiated in August 2015 by an event of intense precipitation, and amplified by advection of freshwater from the coastal regions south of the mooring which collect a strong river runoff until November 2015. The observed oscillation in mid-November 2015 is caused by an oscillation of the zonal advection term, leading to an intensified westward (eastward) transport of relatively low (high) salinity waters (not shown).

3.2.2 Argo and TSG

Although most of the *in situ* measurements are taken at a depth between 5 and 10 meters, it has been chosen to compare them with the salinity in the top layer of the model, in order to be able to analyze these validations in the light of comparisons with satellite measurements taken at the first centimeter of the ocean (note also that there are no strong vertical salinity gradients in the top 5 m of the model water column).

Of the three types of gridded products, satellite observations are the closest to *in situ* data, with r^2 values of 0.94 and 0.89 for comparisons with Argo and TSG data respectively (Table 2). With the exception of TSG measurements taken very close to the coast where the satellite data are slightly overestimated, the differences observed rarely exceed 0.2 pss in absolute value (Figure 4a.e.).

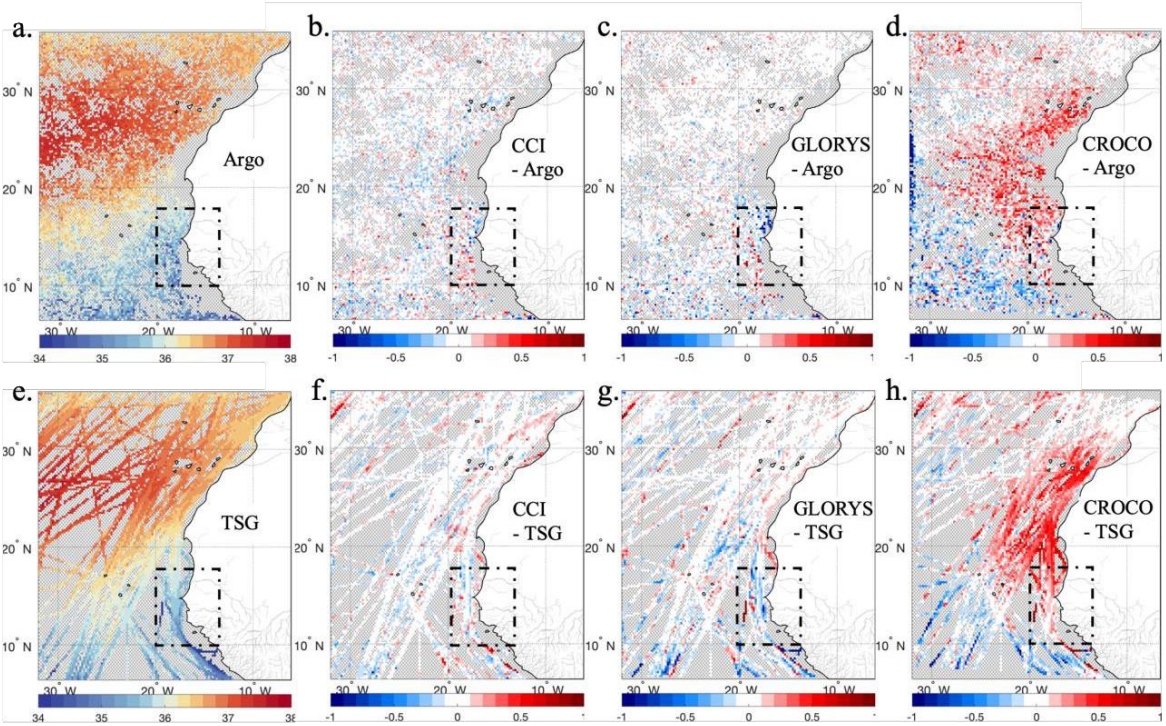


Figure 4:(top) Argo SSS (a) used as reference. Difference between Argo SSS and various SSS fields (CCI (b), GLORYS (c) and CROCOimerg (d)). (bottom) TSG SSS (e) used as reference. Difference between TSG SSS and various SSS fields (CCI (f), GLORYS (g) and CROCOimerg (h)). Comparisons were averaged over 0.2° boxes to ease visualization.

Since the GLORYS reanalysis assimilates Argo data, the statistics of the comparisons with this dataset are very good, as expected. The r^2 values are 0.91 when comparing to Argo, and 0.86 when comparing to TSG, only slightly lower than those obtained with CCI (Table 2). However, there is a negative bias with respect to Argo and TSG measurements taken on the continental shelf at the mouth of the Senegal River (16°N). These Argo data were taken at the end of 2012, which corresponds to a period when river outflows were particularly high (Fig. 5c). It is therefore likely that these differences of around -0.8 to -1 pss can be explained by the use of climatological runoff in GLORYS (Figure 4c.g.).

When CROCO SSS are compared with *in situ* SSS, a significant bias of up to +0.5 pss is observed, which is fairly systematic near the coast and north of 14.7°N. This positive bias is observed with respect to both Argo and TSG data and with all CROCO simulations, thus seems fairly robust. South of 14.7°N and far from the coast (30°W-20°W), a negative bias of the order of -0.2 pss is observed, while the few TSG data available on the continental shelf show a positive bias (Figure 4d.h). There is a stronger bias in CROCOprclm (Table 2), suggesting that the climatological precipitation field strongly attenuates the effect of rainfall on SSS. Comparison statistics between the other simulations and *in situ* data are very close (with maximum absolute differences in terms of r^2 of the order of 0.01), with slightly better results for CROCOimerg.

The seasonal variability of the CROCO SSS bias with respect to CCI shows similar patterns (positive bias near the north Senegalese – Mauritanian coast), regardless of the year (not shown). In the following, these simulations are therefore analyzed on a relative basis after removing the annual mean bias of SSS. The figures shown below are based on fields from which the mean SSS has been removed. The origin of the systematic SSS bias in CROCO is discussed in sect. 4.

The statistics calculated for the e-SNTA region are provided for reference in Table 2. There are significantly fewer co-located points in this region, lower dynamics of SSS and a higher proportion of points close to the coast compared to the global region. Consequently, the statistics are consistently less favorable, with r^2 values reaching 0.43 (0.67) compared to Argo floats (TSG).

Table 2: Summary statistics of comparisons between various salinity products and in situ data over the global / e-SNTA areas (see maps in Fig. 4). "Std diff' stands for "standard difference".

	Argo (17378 / 902 points)			TSG (133139 / 8033 points)		
	r^2	Std diff	bias	r^2	Std diff	bias
CCI	0.94/0.70	0.16/0.30	-0.01/0.01	0.89/0.65	0.20/0.37	-0.01/-0.02
GLORYS	0.91/0.69	0.21/0.32	-0.02/0.01	0.86/0.64	0.23/0.38	-0.01/-0.02
CROCOglofas	0.81/0.43	0.30/0.45	0.07/0.19	0.77/0.65	0.30/0.36	0.14/0.14
CROCOroclm	0.80/0.25	0.31/0.62	0.06/0.14	0.77/0.66	0.30/0.35	0.14/0.13
CROCOisba	0.81/0.34	0.30/0.54	0.06/0.11	0.76/0.67	0.30/0.35	0.14/0.12
CROCOimerg	0.82/0.40	0.30/0.54	0.03/0.07	0.78/0.66	0.29/0.36	0.11/0.10
CROCOprclm	0.69/0.06	0.36/0.63	0.24/0.28	0.67/0.59	0.34/0.42	0.27/0.23

3.3 Origin of the main interannual variations

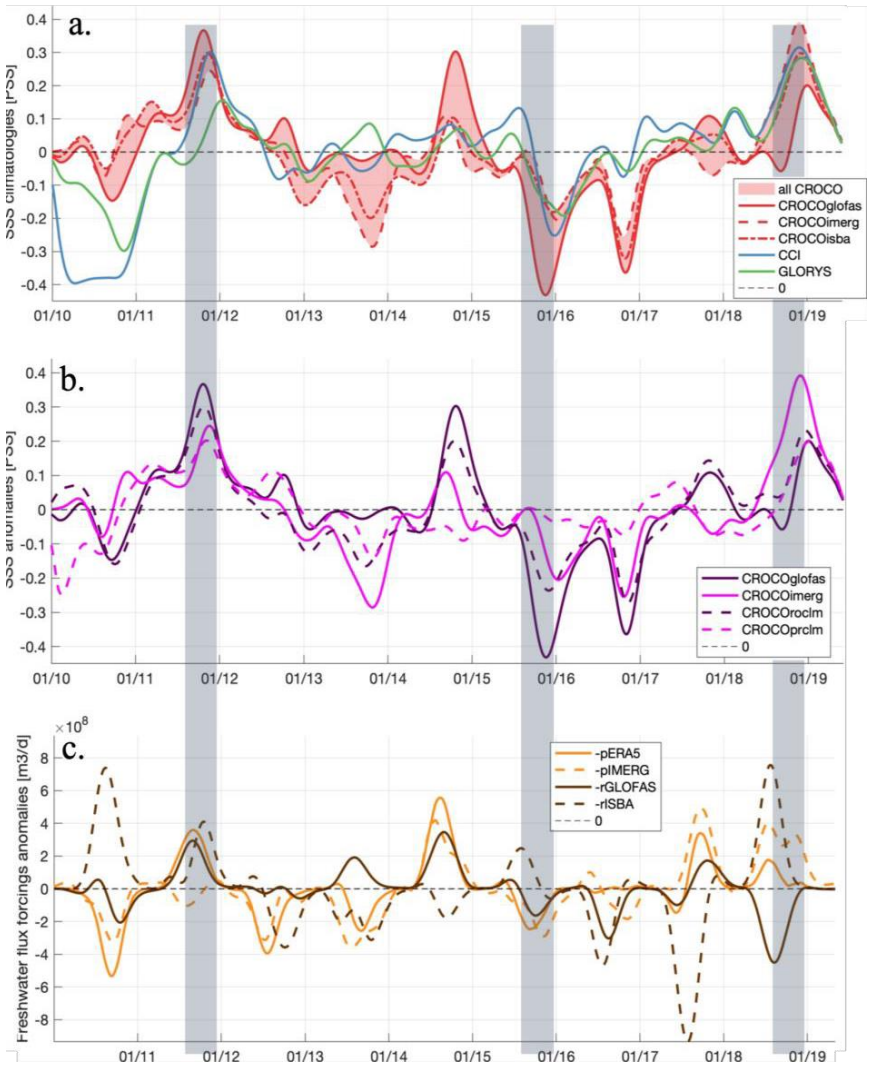


Figure 5: Band-passed SSS anomalies for a) CCI (blue), GLORYS (green) and the three interannual CROCO simulations (red). The red shading represents the range between the minimum and maximum of the simulated SSS. b) SSS anomalies from the CROCO simulation with interannual runoffs (purple solid line) and climatological runoffs (purple dotted line). CROCO simulation SSS anomalies with interannual rain rate (magenta solid line) and climatological rain rate (magenta dotted line). c) Anomalies of the different forcing products, runoffs (brown, GLOFAS plain line, ISBA dashed line) and precipitation (orange, ERA5 plain line, IMERG dashed line). Note that the inverse of the freshwater flux is shown for easier comparison with SSS anomalies. Periods in grey shading correspond to large SSS anomalies f or which a detailed analysis is given in sec tion 3.3.

The interannual anomalies calculated for the different CROCO simulations are now compared to the interannual anomalies of the CCI and GLORYS products, used as references given their good agreement with *in situ* data (Table 2).

Interannual variations of SSS in the e-SNTA are significant, oscillating between -0.4 pss and 0.4 pss and therefore of the same order of magnitude as the seasonal cycle (Figure 2). There is no long-term trend in the anomalies: for each year, anomalies are close to zero during the first half of the year (late winter-summer), and reach their extrema at the end of the year (fall-early winter), lagging by a few months the anomalies of rainfall and runoff (Figure 5c).

Overall, the different SSS estimates are in relatively good agreement: the interannual variability of SSS derived from the CROCO simulations (Figure 5a) correctly represents the main variability compared to CCI and GLORYS. There are differences between CROCO simulations, which can reach 0.2-0.3 pss during the rainy season at the end of the year (e.g., 2014, 2015). For the rest of the year, the differences remain negligible. The strongest CROCO SSS anomalies are generally produced by CROCOglofas.

In 2011, 2015 and 2018 strong SSS anomalies were observed in the CCI and GLORYS products (see grey shading in Figure 5), and were well represented by the CROCO simulations (Fig.5a). Figure 6 shows that the spatial distributions of SSS simulated by CROCOimerg and those of CCI SSS over the region for these three years are very similar during these time periods, which are now studied in more detail.

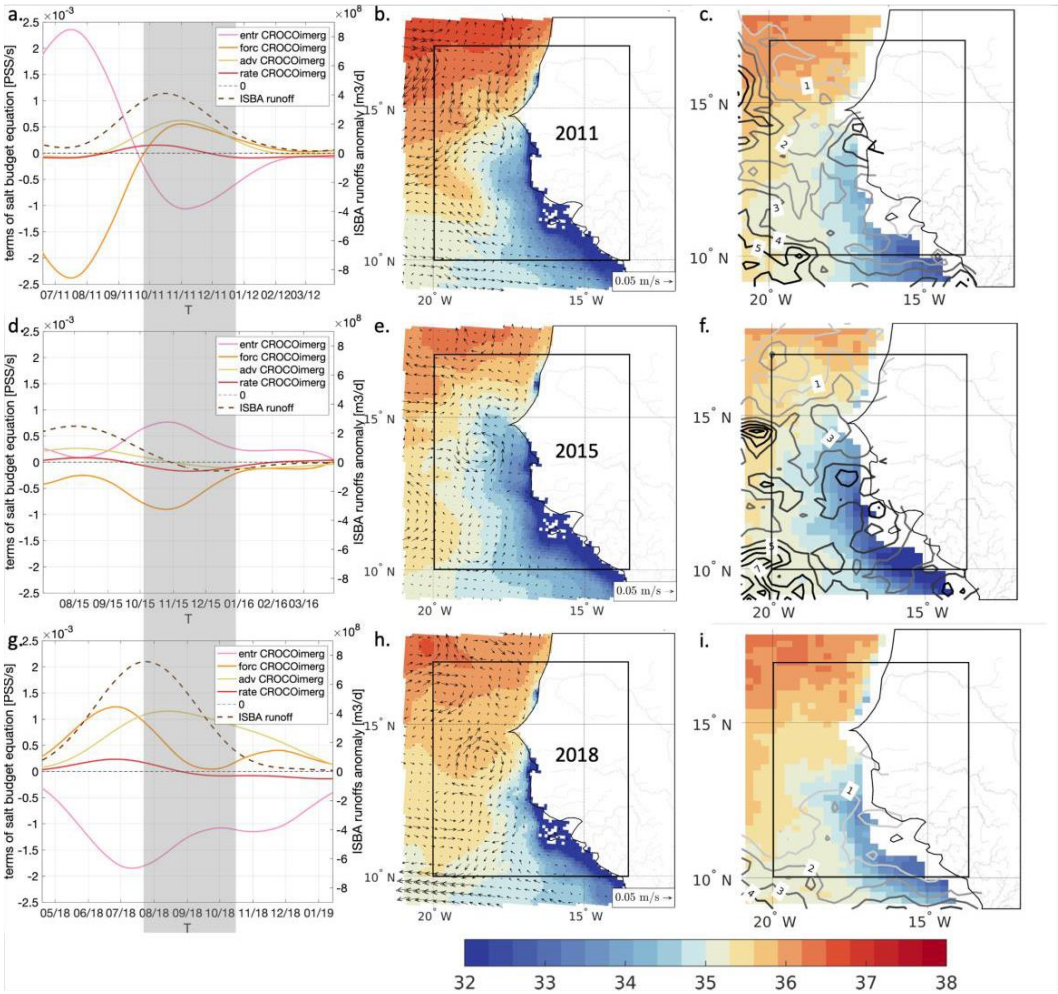


Figure 6: a, d, g): Anomalies of the terms of the salinity balance equation (in pss/day) for CROCOimerg. The orange line represents the effect of the atmospheric forcing, the yellow line the lumped advection term (horizontal and vertical, including runoff forcing), the pink line the entrainment term at the base of the mixed layer. The red line is the SSS rate term, which corresponds approximately to the sum of the other three terms (vertical and horizontal diffusion are negligible). The grey shading marks time periods of strong salinity variations. b, e, h) simulated SSS maps (in pss) averaged over 3 months for CROCOimerg. Arrows show the surface currents anomalies. c, f, i): CCI SSS maps (in pss) averaged over 3 months. Contours show IMERG precipitations (in mm/d, contour spacing is 1 mm/d). Different time periods are shown: 2011 (a, b, c), 2015 (d, e, f) and 2018 (g, h, i).

3.3.1 Positive SSS anomaly in 2011

Around mid-2011, CROCO simulates a steep SSS increase and positive anomaly, which is in good agreement with the CCI anomaly (Figure 5a). The GLORYS anomaly displays the same variation albeit with a lesser magnitude. Although all CROCO simulations reproduce the SSS increase, the CROCOisba anomaly is the closest to the CCI anomaly. As it is found in all CROCO simulations, this anomaly thus is independent of the differences between precipitation and runoff forcing anomalies (Figure 5b,c). The fact that the SSS increase is also found in the simulation with climatological precipitations (CROCOprclm), and that the IMERG and ERA5 rainfall anomalies are of opposite sign (Figure 5c), suggests that this anomaly does not result from a rainfall anomaly. Moreover, the difference in runoff generates a difference in SSS anomalies that is only of second order. Consequently, the SSS increase must arise mainly from the ocean circulation. The salinity balance (Figure 6a.) confirms that a positive anomaly of the advection term is the main cause of the SSS increase. A closer analysis of the advection anomaly indicates that it is mainly due to the anomaly of currents (V'<S>, see Appendix D) related to an increase of the southward wind-driven coastal current (coastal jet) through the climatological poleward gradient of salinity (Figure 6b.).

3.3.2 Negative SSS anomaly in 2015

Starting in mid-2015, most CROCO simulations show a significant freshening (from -0.4 pss for CROCOglofas to -0.2 pss for the other simulations) which is in good agreement with CCI and GLORYS (Figure 5a). In contrast, simulations forced by climatological precipitations (CROCOprclm) display no anomaly, while simulations forced by climatological (CROCOroclm) and ISBA (CROCOimerg) runoff display a freshening of 50% weaker than with GLOFAS runoff (CROCOglofas) (Figure 5b). This suggests that this freshening is initially due to the precipitation anomaly, followed by the subsequent runoff anomaly (Figure 5c). The analysis of the salinity balance equation confirms this hypothesis (Figure 6d.e.): the freshening is due firstly to the rain intensification (October-December 2015). It is then slightly reinforced by the runoff in December-January and by an anomalous salty water outflow at the northern boundary of the e-SNTA region (Appendix D). This anomalous advection of fresh water is amplified by the higher GLOFAS runoff in CROCOglofas. This effect is discussed in more details in sect. 4.

3.3.3 Positive SSS anomaly in 2018

In mid-2018, the SSS anomalies reach ~0.3 pss (Figure 5a). As in 2011, all CROCO simulations, including those with climatological forcing, reproduce this positive anomaly, which thus cannot be attributed to one particular forcing anomaly. Analysis of the salinity balance (Figure 6g) shows that the salty anomaly initially results from the strong negative precipitation anomaly (i.e., rain deficit) found in both ERA5 and IMERG products (Figure 5c). The greater impact of the IMERG

precipitation anomaly on CROCOimerg SSS could be due to a more localized and intense precipitation anomaly in IMERG than in ERA5 (see Appendix A). This precipitation anomaly is accompanied by a large ISBA runoff negative anomaly (Figure 5c), which explains why CROCOprclm also simulates the positive SSS anomaly (albeit weaker than in CROCOimerg) without a precipitation anomaly, and why the simulations using ISBA runoff (CROCOimerg and CROCOisba) display a stronger anomaly than that using GLOFAS runoff (CROCOglofas). Note the surprisingly large GloFAS runoff (Figure 5c), opposed to the rain deficit over the oceanic region during this period.

3.4 SSS Sensitivity to the freshwater forcings

In this section, we investigate more thoroughly the sensitivity of the simulated SSS to a modulation of runoff forcing, all other model forcings being kept identical. We analyze the temporal variability of simulated salinity over the whole simulated period. Three test cases are set up using the simulations described in Table 1: the differences between simulations with a climatological runoff and a synoptic runoff (the GloFAS product) are first analyzed with regards to the interannual variability of forcing; then the difference in SSS induced by the use of the ISBA or GloFAS synoptic runoff products is analyzed. Last, the effects of SSS modulation by precipitation changes is presented.

The panels in **Error! Reference source not found.** depict these case studies. For each case, the difference in SSS between the studied simulations is shown in red, the differences in forcings in the e-SNTA region in solid brown lines, and those occurring south of the e-SNTA region ([5°N 10°N - 10°W 20°W]) in dashed lines. The region south of the e-SNTA is indeed the site of strong freshwater influx, and the general oceanic circulation tends to advect these waters northward into the e-SNTA region. Correlation (r^2) is calculated while allowing for a temporal lag, over the e-SNTA region and the region south of the e-SNTA.

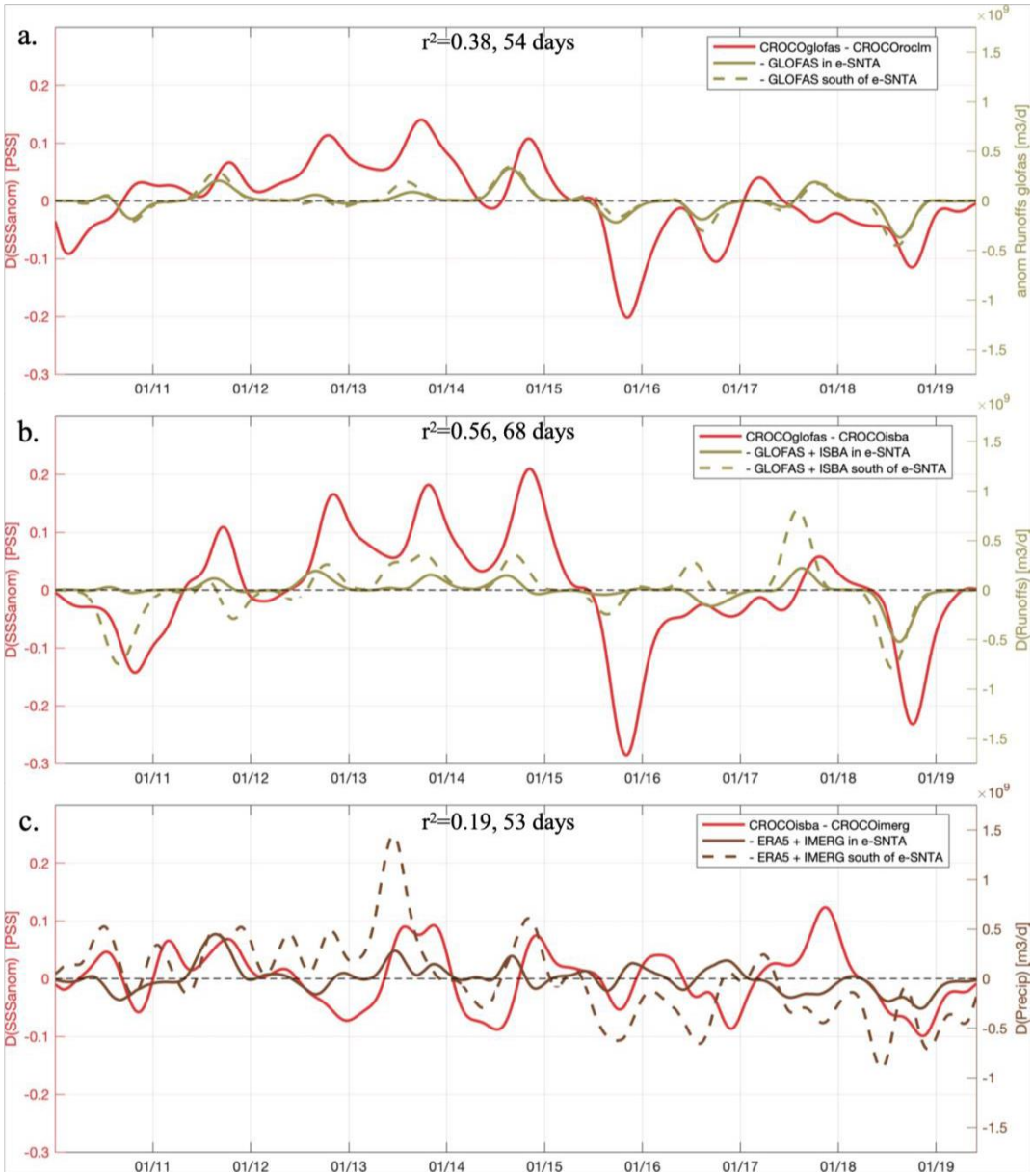


Figure 7: a) GloFAS runoff anomalies (olive green) and difference between SSS anomalies (red) (CROCOglofas-CROCOroclm). b) Differences between GloFAS and ISBA runoffs anomalies (olive green) and differences between SSS anomalies (red) CROCOglofas-CROCOisba). Note that CROCOglofas, CROCOroclm CROCOisba are forced by the same ERA5 precipitation fields. In a) and b),

the sum of the runoff anomalies of rivers flowing directly into the e-SNTA (solid line), and the sum of the runoff anomalies of rivers flowing south of the e-SNTA (dashed line) (Figure 1). c) Differences between IMERG and ERA5 precipitation anomalies (in m^3/d, brown line) in e-SNTA (solid line) and south of e-SNTA (dashed line), and differences between SSS anomalies in e-SNTA (in pss, red line) from simulations using IMERG (CROCOimerg) and ERA5 (CROCOisba) with the same ISBA runoff forcing. To ease the reading of the figure, the sign of precipitation anomalies has been reversed. Correlation (r^2) and time lag between the time series of SSS anomaly and of the sum of the freshwater flux in and south of the e-SNTA regions are shown in the top center of the panel.

3.4.1 SSS sensitivity to interannual versus climatological runoff

The influence of GloFAS interannual runoff variability on salinity is investigated by comparing the CROCOroclm SSS to the CROCOglofas SSS. The other forcings (*i.e.*, ERA5) are kept identical between the two simulations (Table 1) so that the differences observed in SSS is mainly the consequence of the difference in river outflow forcing and its effect on nearshore ocean dynamics. Note that SSS differences can also arise from differences in mesoscale circulation due to dynamical (chaotic) nonlinearities or intrinsic variability unrelated to the forcings.

Interannual runoff variability has a significant effect on SSS (Figure 7a). The GloFAS runoff interannual variability is indeed correlated with the difference between CROCOglofas SSS and CROCOroclm SSS (r^2 of 0.38 for a lag of 54 days; Figure 7a). Differences in SSS may be due to both a local and a remote runoff anomaly (i.e., south of the e-SNTA) (Figure 7a, dotted line).

The salinity balance for CROCOglofas and CROCOroclm (not shown) indicates that, as for the climatological cycle (Appendix B), a difference in runoff is partly compensated by a difference in entrainment of opposite sign. There is indeed a correlation of 0.98 between the runoff interannual anomaly and the entrainment terms difference, 75% of the runoffs anomalies being compensated by entrainment on average. The lag time (54 days) between runoffs anomalies and SSS difference is likely due to a localized (nearshore) effect of the runoffs taking time to spread offshore and to modify the ocean surface layer over the entire e-SNTA.

3.4.2 SSS sensitivity to a change in runoff interannual variability.

The difference between ISBA and GloFAS runoff anomalies is shown on Figure 7b for rivers flowing directly into the e-SNTA (local runoff, solid line) and for rivers flowing in the south of the e-SNTA (dotted lines) (Figure 1). The differences between ISBA and GLOFAS runoffs are greater than the anomalies of either runoff taken independently, as the anomalies are frequently of opposite sign (Figure 5c.). As a consequence, the impact of the total runoff difference on salinity is larger than in the previous case study, with differences reaching 0.3 pss. A r^2 of 0.56 is obtained between the difference in runoffs and the difference in SSS, with a time lag of 68 days; difference of runoffs is also offset by the entrainment at the bottom of the mixed

layer: runoff difference and entrainment difference have indeed a correlation of 0.98 and entrainment compensates on average for 84 % of the runoff difference, with a time lag of 13 days.

In these two case studies, the effect of runoff is variable: small deviations from the climatology can generate significant differences in SSS as in 2015 (Figure 7a,b), while large runoff anomalies sometimes have a limited effect as in 2017 or 2018. These differences in behavior can be explained by surface current anomalies: in 2015, a northwesterly current transports the SSS anomaly linked to river flow, so that it has a greater impact on the mean SSS of the e-SNTA region (Figure 6e). Thus, averaged SSS is particularly affected by a small change in runoff. Conversely, in 2018, (Figure 5.c) the large difference ($1.2.10^9$ m^3d^{-1}) between the two forcings (Figure 7b), with anomalies of opposite signs (Figure 5c), coincided with a northerly wind anomaly (not shown). The SSS anomaly produced by runoff in 2018 is therefore confined to the coasts south of the e-SNTA, it does not spread northward, and it has a relatively little impact (0.22 pss) on the mean salinity of the area (Figure 6h.).

3.4.3 SSS sensitivity to a change in rain rate interannual variability

The effect of a change in precipitation on the modeled salinity, more specifically on the difference induced by ERA5 (CROCOisba) and IMERG (CROCOimerg) synoptic precipitation products, is shown on Figure 7c.

The differences between the IMERG and ERA5 mean precipitation fields are small in comparison with the amplitude of their climatologies, (Figure 5c, Appendix B), but the aggregated freshwater fluxes over the e-SNTA are of the same order as the differences between runoffs forcings. The differences in SSS resulting from this difference in rain rate (Figure 7c) are weaker than those associated with runoff differences and not strongly driven by the effect of rain, in contrast to the effect of river discharge (sect. 3.4), as shown by the low correlation (r^2=0.19). Note, however, that differences in SSS seem to be linked to differences in precipitation over certain periods (e.g., mid 2011, mid-2013, late 2014). As for runoff, the salinity balance of CROCOimerg shows that an anomaly in the rain rate forcing term is nearly totally compensated by an anomaly in the entrainment term (Figure 6a.d.g.). This adjustment is exactly correlated with the rainfall difference (r^2=0.99), and the entrainment difference compensates in average 98 % of the forcing term difference. The weaker correlation with precipitation than with runoff anomalies could be explained by the fact that precipitation anomalies are weaker locally but spread over a larger region than runoffs.

4 Conclusions and discussion

4.1 Conclusions

SSS are simulated over the period 2010-2019 using an ocean circulation regional model (CROCO) off the west African region forced by various precipitation and river runoff products. The simulated SSS are compared to various local and global data sets: the CCI satellite product, the GLORYS reanalysis, the ARGO floats data base, a coastal mooring and TSG measurements. The comparisons show that modelled SSS is systematically too high north of 15°N. Nevertheless, comparison with a coastal mooring 20 km off the coasts of southern Senegal show an excellent agreement. The simulation forced by IMERG precipitation and ISBA runoff is slightly closer to the observations than the other simulations, on average over the period of study.

The simulated SSS are analysed in terms of seasonal cycle and interannual anomalies averaged over the eastern Southern North Tropical Atlantic (e-SNTA). At first order, the amplitude and phase of the SSS seasonal cycle are only slightly modified by the different precipitation and runoff products used as model forcing. However, there is a time lag of about 2 weeks between the simulations, which corresponds to a shift in the seasonal cycles of the two runoff products, and a difference in amplitude of 0.1 pss, which may be due to a difference in precipitation forcing. The seasonal cycles of the CCI satellite data and the GLORYS reanalysis are also out of phase by about 2 weeks, which could originate from the climatological runoffs used in the GLORYS reanalysis. Analysis of the modelled mixed layer SSS budget indicates that the SSS decrease during the rainy season is driven initially by precipitation and a few weeks later by river runoff by means of horizontal advection. Note that these negative trends are partly (nearly fully) compensated for runoffs (precipitation) by entrainment of relatively saline subsurface water into the mixed layer.

Despite the systematic model bias, modelled and observed SSS interannual variations are very consistent. Large SSS anomalies are often correlated with large precipitation or runoffs anomalies within the e-SNTA and from neighbouring regions whose surface waters are then advected by surface currents into the e-SNTA. However, a propagation of the river plume is not systematic, and depends in particular on the wind-driven surface circulation patterns.

A study of the sensitivity of SSS to precipitation and runoff shows a different response of the surface ocean to the two types of forcing. A difference in precipitation is almost totally compensated by entrainment, while a difference in runoff is compensated by between 75% and 84% on average. For a change in forcing of an equivalent order in terms of mean freshwater input, surface salinity is therefore more impacted by river runoffs than by precipitation.

4.2 Disparity of river discharge products

This study also highlights the disparity between two river discharge products available for West Africa. The GloFAS and the ISBA products are rather consistent in terms of seasonal cycle amplitude, with a maximum difference of 3.10^8 m^3/day (Appendix B), but the phasing of the cycle is shifted by about 2 weeks and interannual anomalies are frequently of opposite sign (Figure 5c). This is in line with results from (Decharme et al. 2019) showing that runoffs simulated by different hydrological models driven by various precipitation products have a significant disparity in the intensities and phase of seasonal runoff cycles (*e.g.*, see Fig 14 of (Decharme et al. 2019)).

To understand the origin of these disparities, the runoff anomalies of each product are compared with the rainfall anomalies over the catchment areas of the rivers flowing through the study region (see Figure 1 for catchment delimitation). Runoff anomalies of each product are strongly correlated with the rainfall anomalies used in the hydrological models (Figure 8): GloFAS runoff anomalies are correlated with an r^2 of 0.87 to the ERA5 rainfall anomalies over the catchment area, with a time lag of 22 days, and ISBA runoffs anomalies are correlated with the IMERG rainfall anomalies over the catchment area with an r^2 of 0.56, and with a time lag of 33 days. This suggests that the quality of runoffs estimation is highly dependent on the quality of the estimation of rainfall on land. Comparisons of modelled SSS with *in situ* SSS over the entire period (2010-2019) show slightly better results in simulations forced by ISBA, but using the GloFAS (resp. ISBA) product leads to more accurate modelled SSS at the beginning (resp. end) of the studied period. In conclusion, the present study presents an indirect evaluation of runoff interannual variability by analyzing their impact on surface ocean salinity.

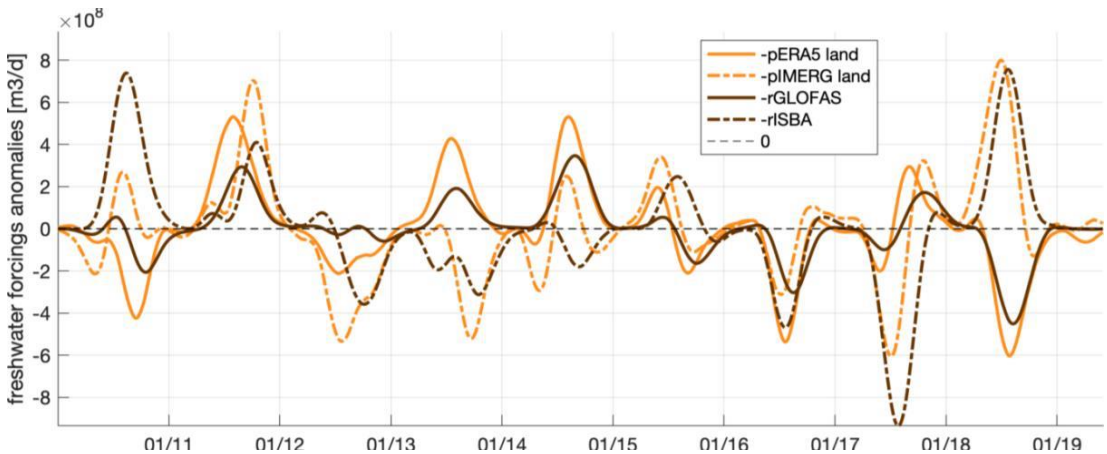


Figure 8: Runoff anomalies (brown) and watershed precipitation anomalies (orange), for GloFAS and ERA5 (solid lines) and ISBA and IMERG (dashed lines), in m^3/d, over the catchment areas of the rivers flowing through the study region (see Figure 1 for catchment delimitation).

4.3 CROCO SSS uncertainties

Over several time periods (*e.g.*, 2010, 2013, 2014 and 2016; Figure 5a), the CROCO SSS anomalies are markedly different from those of the reference products (GLORYS and CCI). In 2010, the CROCO anomalies appear to be underestimated compared with CCI, which shows a very strong freshening (~-0.4pss) during most of the year (Figure 5a). However, this period corresponds to the beginning of the CCI product time series, during which the SMOS calibration was still unstable. The GLORYS product also shows a freshening (-0.15 pss), but weaker than in CCI and more similar to the CROCO SSS anomaly. The CROCOglofas simulation is the most accurate in 2010 with respect to CCI and GLORYS. In 2013, there is a large disparity in SSS (up to 0.3 pss) between the various CROCO simulations. The CROCOglofas SSS displays a very weak anomaly, similar to CCI, while all the other CROCO simulations show a moderate freshening (-0.15 pss to -0.28 pss). These discrepancies could be explained by the relatively large difference in runoff during this time period (Figure 5c). CROCOglofas is less biased than CROCOisba with respect to CCI and GLORYS, suggesting that the GloFAS 2013 anomalously low runoff (i.e., positive anomaly) is more realistic. In contrast, in 2014, CROCOglofas shows an unrealistic, high positive SSS anomaly, not found in the other simulations. This strong anomaly is associated with an anomalously low GloFAS runoff, in contrast to the ISBA anomalously high runoff driving the more realistic SSS anomaly in CROCOisba. In 2016, the CROCO simulations are in relatively good agreement with one another, but display a much stronger freshening than found in both reference products. Only CROCOprclm does simulate correctly the moderate freshening (Figure 5b, see magenta dotted line). Analysis of the salinity balance shows that advection drives the overly strong freshening (Appendix D), which may result from surface currents driven by unrealistic ERA5 winds in this time period. However, intrinsic variability may play a role as CROCOprclm is also driven by ERA5 winds.

4.4 Impact of a monthly climatological precipitation forcing

The CROCOprclm simulation was designed to suppress the effect of interannual precipitation variability on salinity. However, the calculation of a monthly climatological precipitation field by averaging monthly precipitation rates from various years drastically changes the distribution of precipitation (Appendix A.2) by smoothing and attenuating the highly localized precipitation phenomena. Climatological values do not exceed 2.10^{-2} m/day, which is too low for synoptic fields. So, rather than the effect of temporal precipitation anomalies, this simulation highlights the effect of a reduction of spatial rainfall variability. To reproduce a commonly observed forcing, it would be better to design a daily climatological field consisting of a succession of typical years with realistic precipitation distribution, but scaled to a climatology in terms of total precipitation quantities. Such experiments are planned for future studies.

4.5 Origin of CROCO SSS uncertainties

As seen in sect. 3.2.2, the CROCO SSS in all simulations were too high with respect to observations, mainly north of Cape Verde (15°N). This SSS bias is in fact associated with a positive temperature bias of ~0.5-1.5°C (Appendix E). Such an SST bias is estimated to lead to an excess of evaporation that could explain about one third of the SSS bias (see histograms in appendix E). The remaining SSS biases could be due to a salinity bias in the subsurface waters transported to the surface layer by coastal upwelling and then offshore by Ekman currents.

Other processes neglected or misrepresented in the regional model may impact the SSS bias. First, the salinity of the river inflows (i.e., the runoff salinity), set to 15 pss in our study, may have an impact. . This choice is debatable as it is expected that the salinity from rivers would be closer to 0 pss. For example, salinity gradually increases from ~0 pss at ~7 km from the coast to 10 pss at the estuary mouth of the Suwannee River in West Florida (Laurel-Castillo and Valle-Levinson (2023)).

Most West African river mouths have the particularity of being located near very flat coasts, which promotes the formation of large estuaries, despite their relatively low runoff (Descroix et al. 2020). These large estuaries allow the intrusion of seawater inland and facilitate water evaporation. Salinity in the Senegal River reach a minimum of 10 pss in October, at the peak of the flow, and 35 pss in winter (Mikhailov and Isupova (2008)). The Sine Saloum and Casamance rivers even have inverse estuaries, with estuarine salinity higher than that of the ocean (Pagès and Citeau 1990, Descroix et al. 2020).

The value of 15 pss was chosen considering mixing between river waters and seawater as well as evaporation inside the estuary. However, the effect of a change in CROCO runoff salinity can impact on SSS in the freshwater plume: a sensitivity study shows that setting the runoff salinity to 1 pss instead of 15 pss can lead to a decrease in SSS of about 1 pss in regions traversed by the plume (see Appendix F). Future studies should take into account the seasonal variability of runoff salinity, when data is available. It should be noted that this effect on SSS from a reduction in runoff salinity has little impact offshore of the Senegal river (Appendix F) and thus does not explain the positive SSS bias north of 15°N (Figure 4).

Last, tidal effects were not taken into account in our simulations, mainly to reduce computing time (a short model time step is required in the presence of strong tidal currents). However, it has been shown in the Amazon plume region that tides can impact plume propagation (Ruault et al. 2020) and conversely, that river flows can enhance tidal elevation (Durand et al. 2022). A sensitivity study of SSS to tides shows that tides can, in some cases, cause an increase in average SSS in the e-SNTA region of about 1 pss due to increased vertical mixing (Appendix F). Thus, including this effect thus would not reduce the positive bias north of 15°N and the impact on our results is likely to be weak. However, a more detailed evaluation of the tidal effect on river plume propagation in our region of interest would be needed to confirm these results.

Data availability: TSG data are available at https://doi.org/10.6096/SSS-LEGOS; Argo data have been downloaded from Pi-MEP database on https://pimep.ifremer.fr/diffusion/data/cci-l4-esa-merged-oi-v3.2-7dr/argo/. Melax data are available on https://zenodo.org/records/4095436. CCI data are available at The Centre for Environmental Data Analysis (CEDA) (https://dx.doi.org/10.5285/5920a2c77e3c45339477acd31ce62c3c). GLORYS reanalysis data are available on https://doi.org/10.48670/moi-00021; the ERA5 dataset provided by the ECMWF is available on https://cds.climate.copernicus.eu/cdsapp#!/dataset/reanalysis-era5-single-levels?tab= overview. CROCO model informations are available on https://www.CROCO-ocean.org/ (Hilt et al. 2020). Given the large size of the modeling experiment outputs (~1.6 TB for each simulation), the dataset is not stored online and can be shared upon request to the corresponding authors. The ISBA-CTRIP data are available from the authors (Decharme et al. 2019). IMERG data are available on https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/GPM_3IMERGDF_07/summary?keywords=%22IMERG%20final%22; GloFAS data are available on https://cds.climate.copernicus.eu/cdsapp#!/provider/provider-cems-without?tab=overview.

Acknowledgements: This work is part of the PhD of Clovis Thouvenin-Masson funded by CNES and ACRI-st. We also received funding support from ESA CCI+SSS project (4000123663/18/I-NB) and CNES (the French National Center for Space Studies) through the TOSCA SMOS-Ocean. CROCO modelling experiments were conducted on the IDRIS HPC Jean-Zay under DARI projects A0110101140 and A0130101140. GLORYS global ocean model outputs were provided by the Copernicus Marine Environment Monitoring Service (CMEMS). We thank X. Perrot for discussions about rain rates products, M. Gevaudan, J. Jouanno and S. Biancamaria for providing precious information about ISBA-CTRIP.

Appendix A: Distribution of precipitation forcings

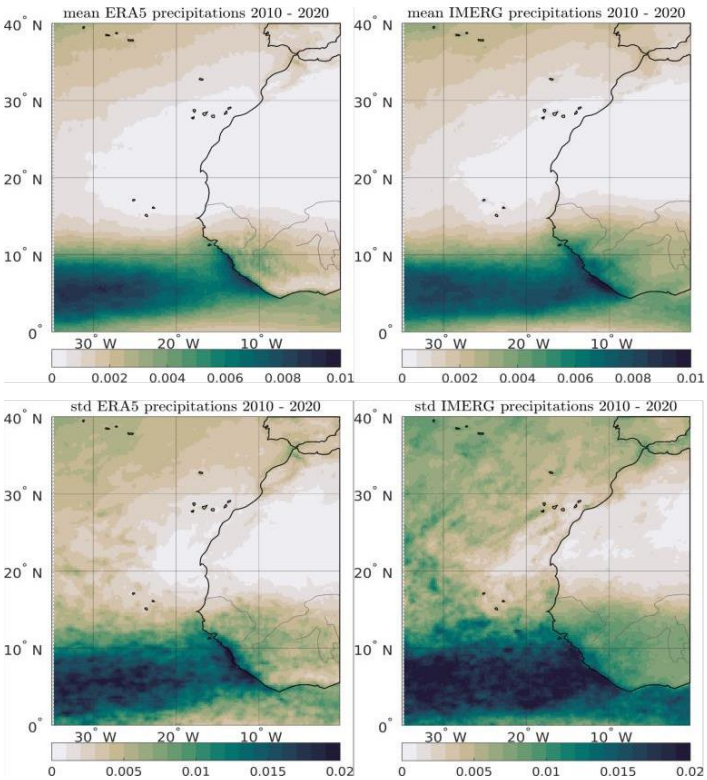


Figure A.1: Distribution of ERA5 (left) and IMERG (right) precipitation (in m/day). Average precipitation between 2010 and 2019 (top), standard deviation of precipitation over the same period (bottom).

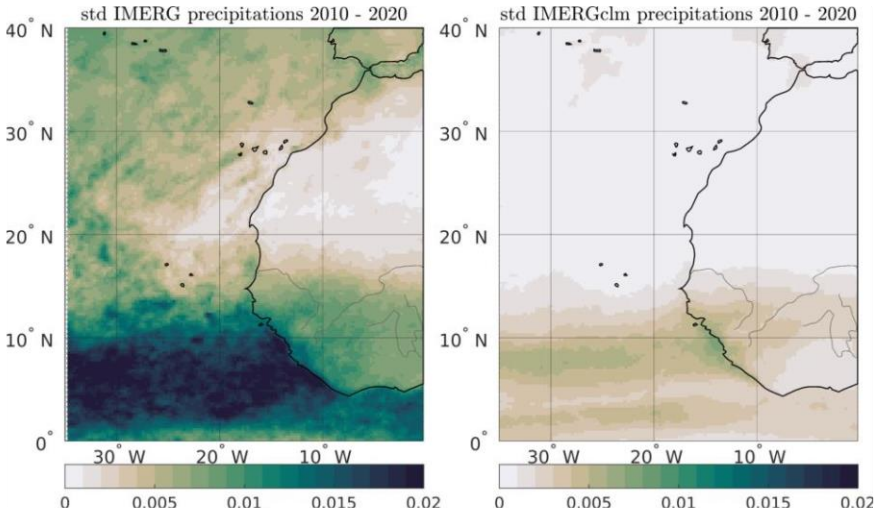


Figure A.2: Standard deviation of IMERG precipitation (in m/day) (left) and the one used in the CROCOprclm simulation (right) over 2010-2020.

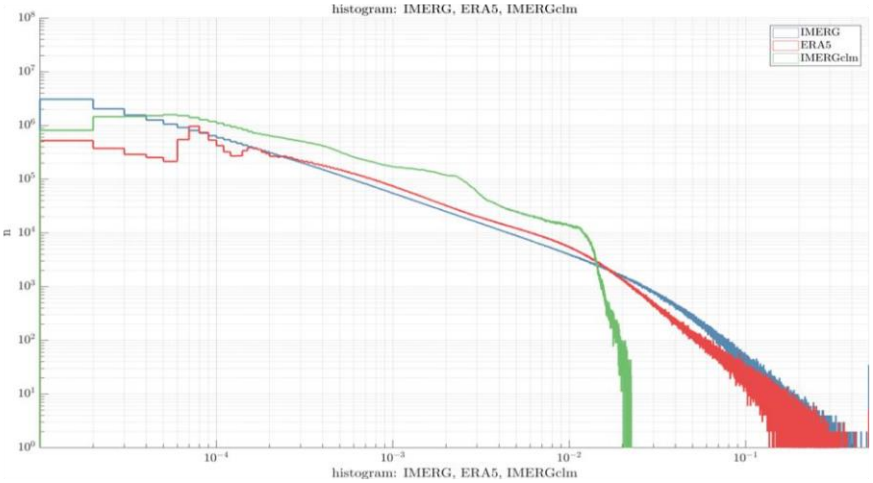


Figure A.3: Histogram of the ERA5 precipitation (red), IMERG precipitation (blue) and monthly-mean climatological precipitation (in m/day) used in the CROCOprclm simulation (green). Note that scales are logarithmic.

Appendix B: Mean seasonal cycle in e-SNTA

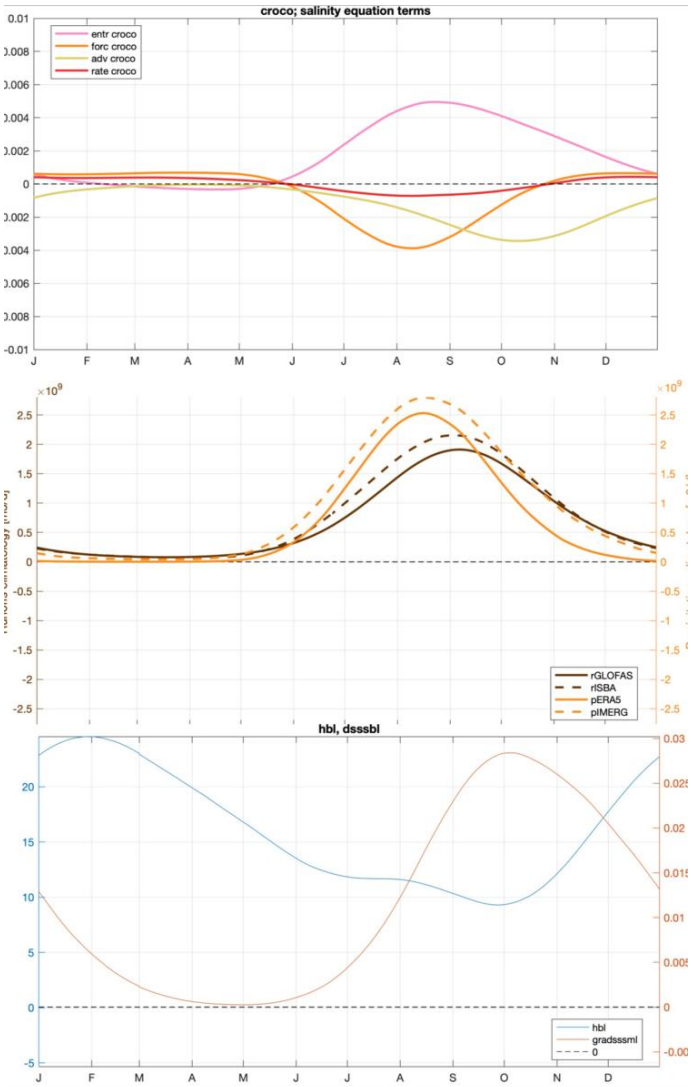


Figure B.1: Seasonal cycle of the SSS budget in the e-SNTA region (simulation CROCOglofas). (top) Trends of the salinity balance equation (in pss/day). The orange line represents the effect of the atmospheric forcing, the yellow line the lumped advection term (horizontal and vertical, including runoff forcing), the pink line the entrainment term at the base of the mixed layer. The red lin e is the SSS rate term, which corresponds approximately to the sum of the other three terms (vertical and horizontal diffusion are

negligible). (middle) ERA5 and IMERG precipitation (orange, in m^3/day), GloFAS and ISBA runoff (yellow) climatologies (in m^3/day). (bottom) Mixed layer depth anomalies (in m; blue) and salinity gradient at the base of the mixed layer (in pss/m; red).

Appendix C: salinity balance at Melax

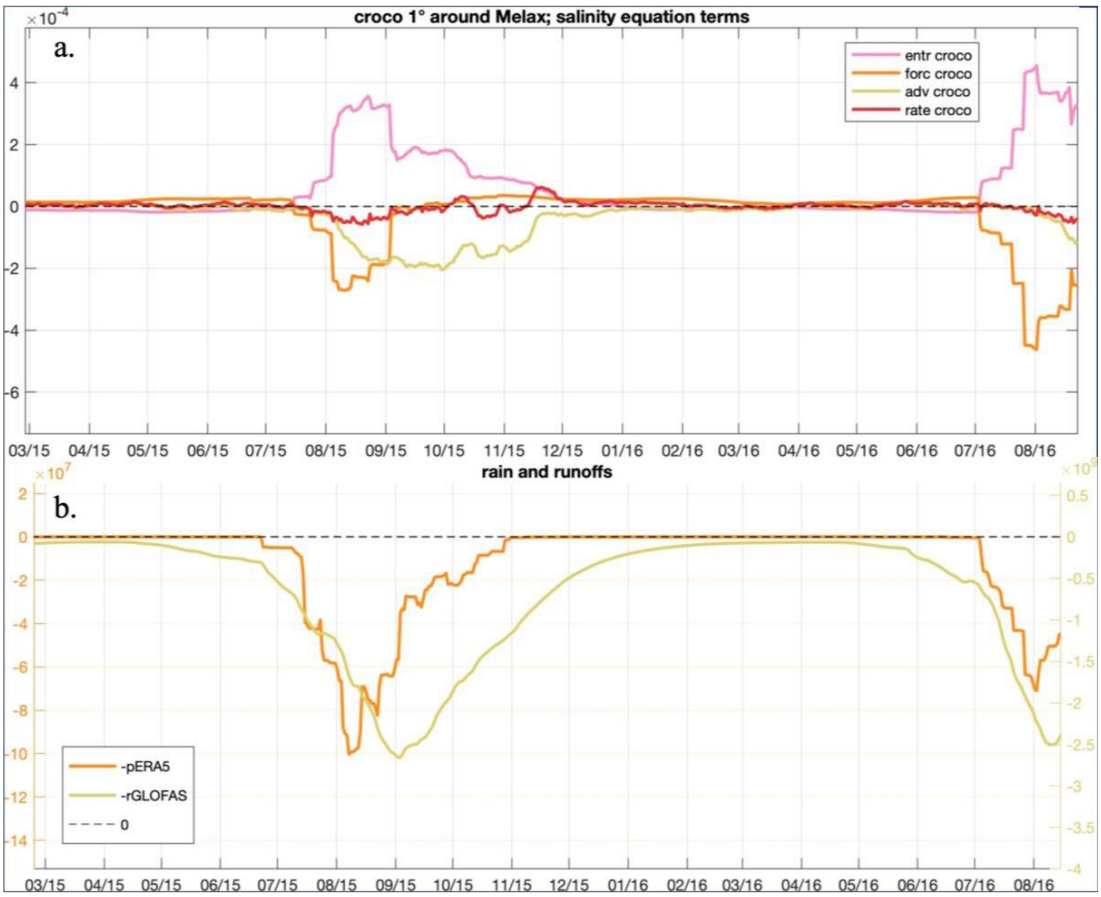


Figure C.1: (a) Anomalies in the terms (in pss/day) of the salinity balance equation of the CROCOglofas simulation and (b) anomalies in the corresponding forcings (precipitations from ERA5 (orange) and runoffs from GloFAS (yellow), in m^3/day) at the Melax point. The colors in (a) are identical to those in Fig. B1.

Appendix D: Salt flux at the border of e-SNTA for CROCOimerg simulation

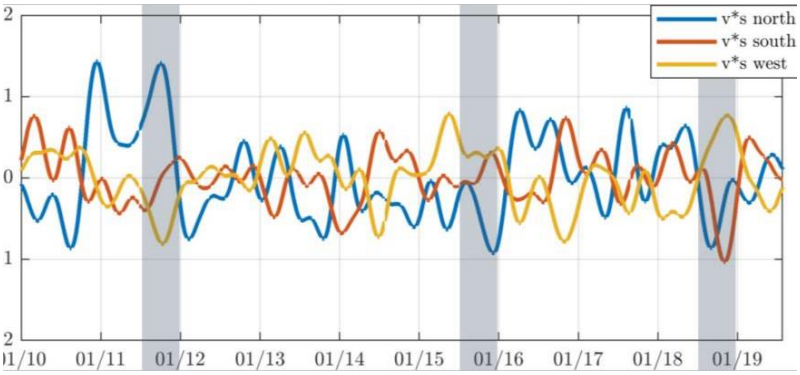


Figure D.1: Band-passed anomalies (using a three-month running mean) in anomalous salt flux (V'.<S>) through the boundaries of the e-SNTA region due to a surface current anomaly (V') multiplied by climatological salinity <S> at the border. Blue line: flux through the northern boundary; red line: flux through the southern boundary; yellow line: flux through the western boundary. Positive flux indicates a salt input in the e-SNTA region.

Appendix E: SST and SSS biases in CROCO simulations

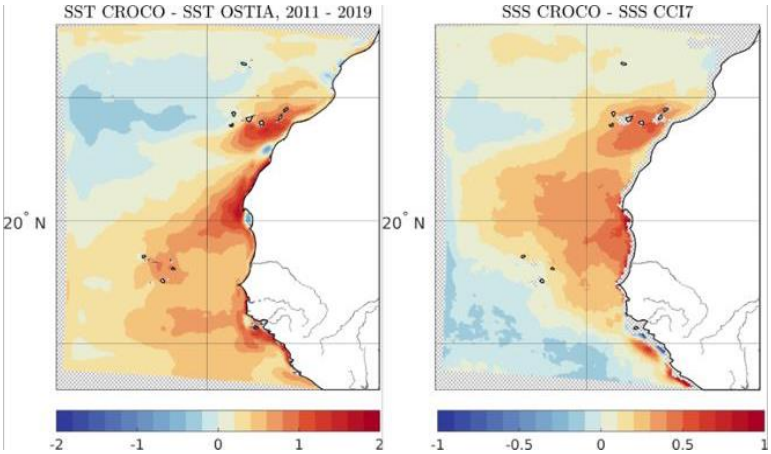


Figure E.1: (left) Average SST bias (in °C) between CROCOGloFAS simulated SST and OSTIA SST and (right) average SSS bias (in pss) between the CROCOGloFAS simulated SSS and CCI SSS .

We observe a bias of the model in SST compared with the OSTIA (Operational Sea Surface Temperature and Ice Analysis; Donlon et al. (2012)) satellite SST (Figure E.1a). Here we seek to determine whether this SST bias may be at the origin of the SSS bias discussed in the body of the article (Figure E.1b). Indeed, a bias in SST generates an evaporation deviation, which has an influence on salinity in the mixed layer. The SSS bias resulting from the SST bias is estimated to first order using the bulk heat flux equations by the method described below: it is of the same order of magnitude as the SSS biases observed between CROCO and CCI (Figure E.1).

Bulk formulations describe flows at the air-sea interface, including evaporation:

$$E = \rho C_q (q_0 - q_z) u$$

With E the evaporation, ρ the density, C_q the Bulk coefficient, u the wind speed at altitude z above the surface. q_z represents the specific humidity at altitude z, and q_0 the saturation specific humidity of the air at surface temperature θ_0;
q_z and q_0 are dependent on surface temperature and pressure, and are written as:

$$q_z = q_{sat}(d_z, SLP)$$

$$q_0 = 0.98 q_{sat}(\theta_0, SLP)$$

Noting SLP as the air pressure at the surface and e_{sat} as the partial pressure of water vapor, we can calculate the specific humidity at a temperature T from the following formula:

$$q_{\text{sat}}\,(T, SLP) = \frac{\epsilon e_{\text{sat}}\,(T)}{SLP - (1-\epsilon) e_{\text{sat}}\,(T)} \epsilon = 0.62$$

e_{sat} can be determined by the Goff Gratch equation:

$$\begin{gathered} log_{10}\big(e_{\text{sat}}\,(T)\big) = 10.79574(1 - T_0/T) \\ -5.028 log_{10}\,(T/T_0) \\ T_0 = 273.16 \\ +1.5047510^{-4}\big[1 - 10^{-82969(T/T_0 - 1)}\big] \\ +0.4287310^{-3}\big[10^{4.76955(1 - T_0/T)} - 1\big] \\ +0.78614 \end{gathered}$$

Noting SSTi as the model SST and SSTf as the SST Ostia, switching from one to the other generates a difference in evaporation ΔE :

$$\frac{\Delta E}{E_i} = \frac{q_{0f} - q_{0i}}{q_{0i}} = \frac{q_{SAT}\big(T_f, SLP\big) - q_{SAT}(T_i, SLP)}{q_{SAT}(T_i, SLP)}$$

This difference is then incorporated into the salinity balance equation (equation 6), with the other terms (including mixed layer depth) unchanged at first order:

$$\Delta\, \partial_t \boldsymbol{S} = -\frac{\Delta E}{E_i} \,.\, E_i . \frac{S}{H}\Big|$$

.

This gives a change in the SSS rate at each time step, which can be added to the model's salinity trend. The mean deviation obtained is of the same order of magnitude as the deviation between CROCO SSS and CCI SSS, although generally smaller.

The geographical pattern (not shown) is similar, although this is a rough estimate that does not take into account, for example, the advection of saltier waters obtained after this correction.

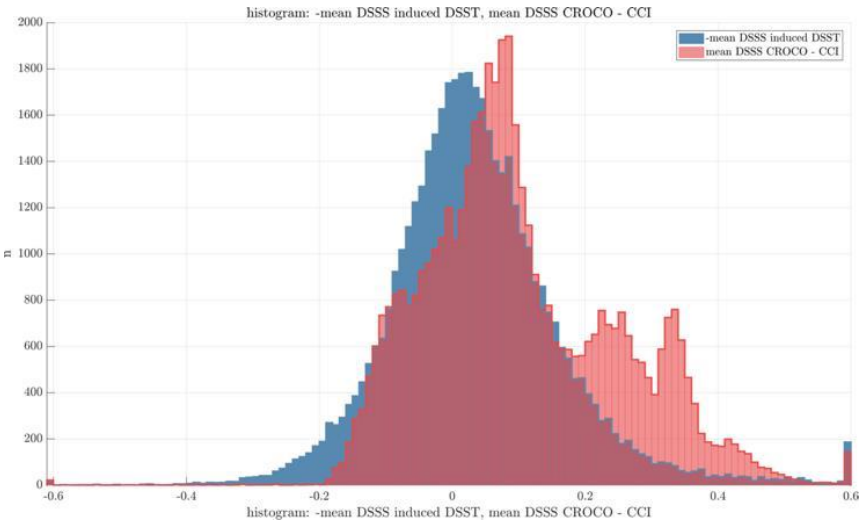


Figure E.2: histogram showing the salinity bias between the CROCOglofas simulation and CCI (red) and the expected SSS bias linked to the SST bias (blue), in pss.

Appendix F: Sensitivity of SSS to river water salinity and tides.

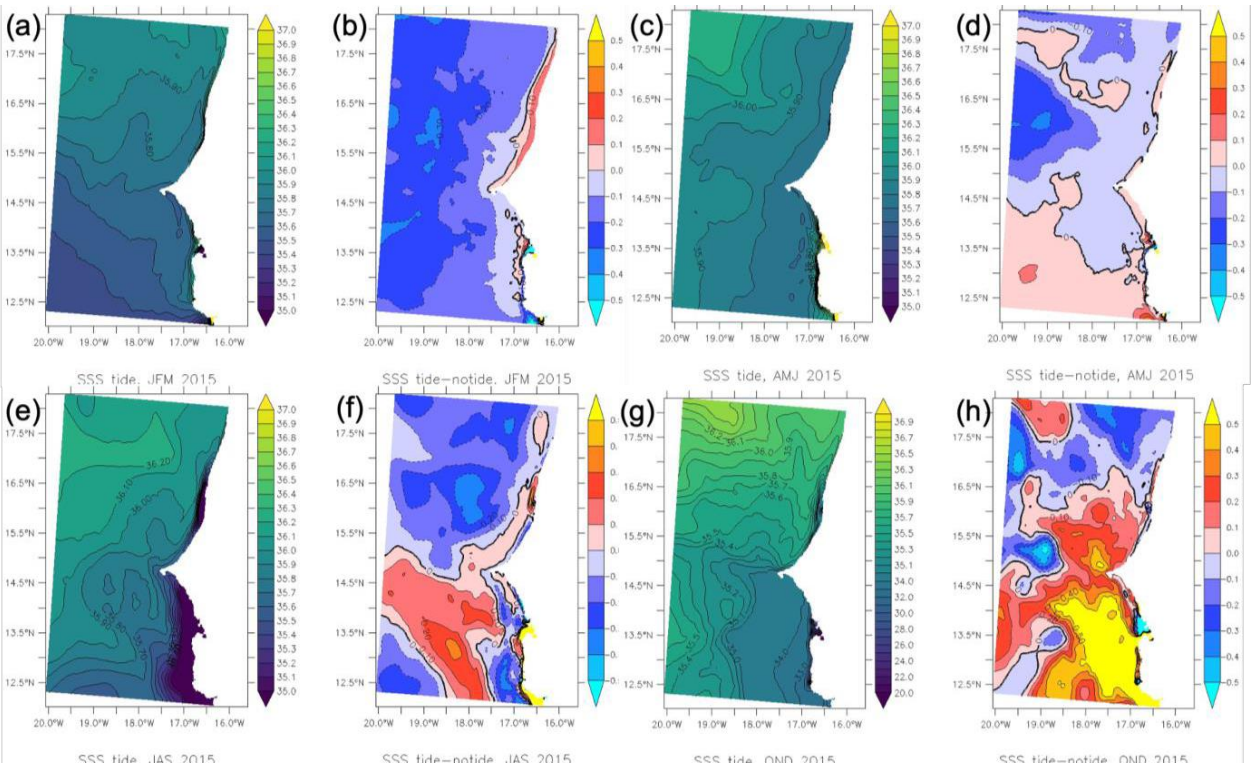


Figure F.1: Effect of tides on Sea Surface Salinity (SSS), in pss, in the e-SNTA region in 2015. The maps show the simulated salinity with tides (a, c, e, g) and the difference from simulations obtained without tides (b, d, f, h). Maps averaged over 3 months: JFM (January to March) (a, b), AMJ (April to June) (c, d), JAS (July to September) (e, f), OND (October to December) (g, h). The tidal effect on SSS, leading to an increase of SSS in the plume, is mostly seen in OND (h).

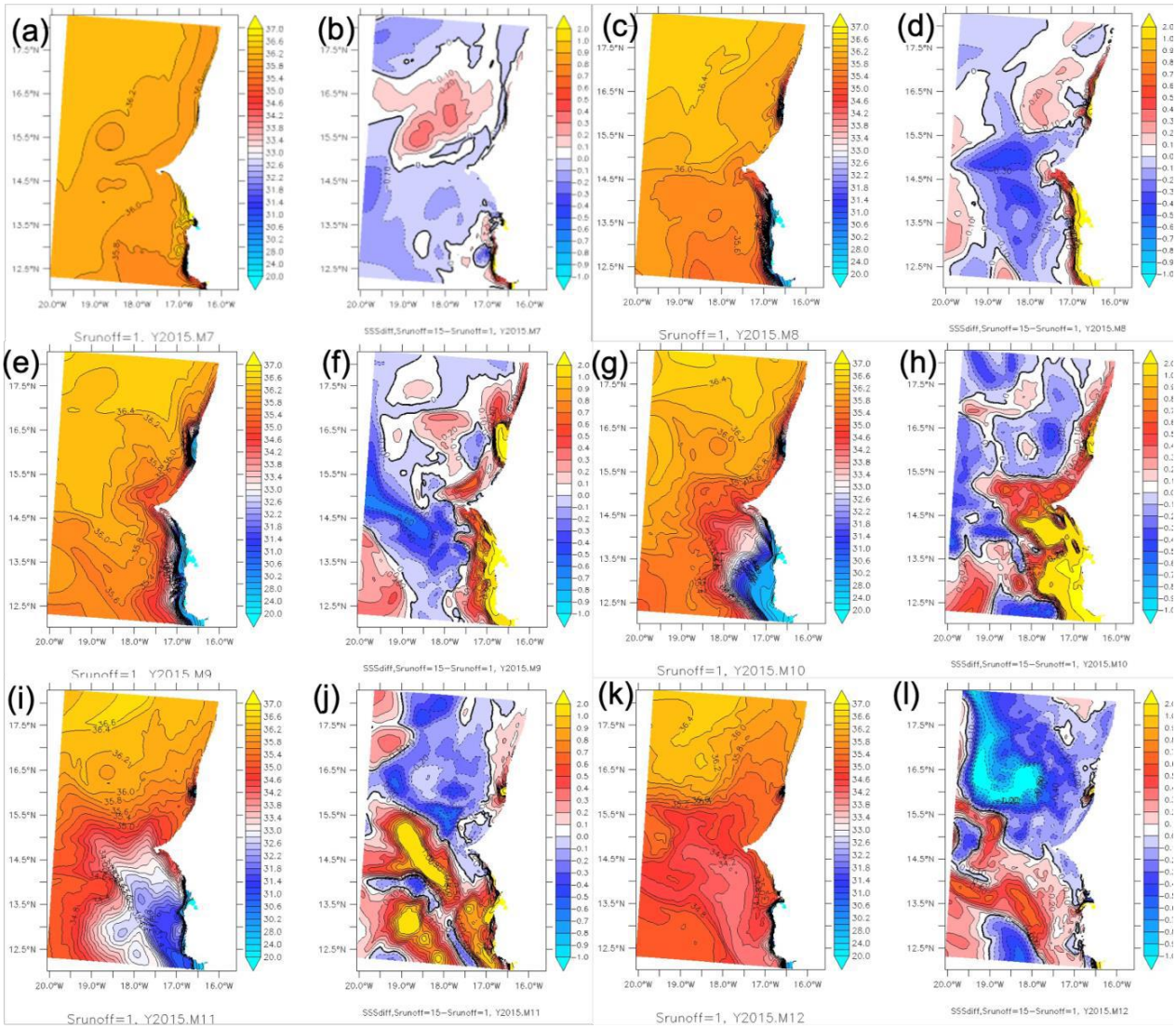


Figure F.2: Effect of a change in river salinity on Sea Surface Salinity (SSS), in practical salinity units (psu), in the e-SNTA region in 2015. The maps initially show the simulated salinity with river salinity of 1 pss (a, c, e, g, i, k) and the difference from simulations obtained with river salinity of 15 pss (b, d, f, h, j, l). Maps averaged over 1 month: July (a, b), August (c, d), September (e, f), October (g, h), November (i, j), December (k, l).

References

Alory, G., T. Delcroix, P. Téchiné, D. Diverrès, D. Varillon, S. Cravatte, Y. Gouriou, J. Grelet, S. Jacquin, E. Kestenare, C. Maes, R. Morrow, J. Perrier, G. Reverdin and F. Roubaud (2015). "The French contribution to the voluntary observing ships network of sea surface salinity." Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers **105**: 1-18.

Ardoin-Bardin, S., A. Dezetter, E. Servat, J.-E. Paturel, G. Mahe, H. Niel and C. Dieulin (2009). "Using general circulation model outputs to assess impacts of climate change on runoff for large hydrological catchments in West Africa." Hydrological Sciences Journal **54**(1): 77-89.

Beck, H. E., A. I. Van Dijk, V. Levizzani, J. Schellekens, D. G. Miralles, B. Martens and A. De Roo (2017). "MSWEP: 3-hourly 0.25 global gridded precipitation (1979–2015) by merging gauge, satellite, and reanalysis data." Hydrology and Earth System Sciences **21**(1): 589-615.

Boutin, J., N. Reul, J. Köhler, A. C. Martin, R. Catany, S. Guimbard, F. Rouffi, J.-L. Vergely, M. Arias, M. C. . and et al. (2021). "Satellite-based Sea Surface Salinity designed for Ocean and Climate Studies." Earth and Space Science Open Archive: 46.

Boutin, J. V., J.-L.; Reul, N.; Catany, R.; Koehler, J.; Martin, A.; Rouffi, F.; Arias, M.; Chakroun, M.; Corato, G.; Estella-Perez, V.; Guimbard, S.; Hasson, A.; Josey, S.; Khvorostyanov, D.; Kolodziejczyk, N.; Mignot, J.; Olivier, L.; Reverdin, G.; Stammer, D.; Supply, A.; Thouvenin-Masson, C.; Turiel, A.; Vialard, J.; Cipollini, P.; Donlon, C. (2021). "ESA Sea Surface Salinity Climate Change Initiative (Sea_Surface_Salinity_cci): weekly and monthly sea surface salinity products, v03.21, for 2010 to 2020." NERC EDS Centre for Environmental Data Analysis, 08 October 2021.

Camara, I., N. Kolodziejczyk, J. Mignot, A. Lazar and A. T. Gaye (2015). "On the seasonal variations of salinity of the tropical A tlantic mixed layer." Journal of Geophysical Research: Oceans **120**(6): 4441-4462.

Chandanpurkar, H. A., T. Lee, X. Wang, H. Zhang, S. Fournier, I. Fenty, I. Fukumori, D. Menemenlis, C. G. Piecuch, J. T. Reager, O. Wang and J. Worden (2022). "Influence of Nonseasonal River Discharge on Sea Surface Salinity and Height." Journal of Advances in Modeling Earth Systems **14**(2).

Chandanpurkar, H. A., J. T. Reager, J. S. Famiglietti and T. H. Syed (2017). "Satellite-and reanalysis-based mass balance estimates of global continental discharge (1993–2015)." Journal of Climate **30**(21): 8481-8495.

Dai, A., T. Qian, K. E. Trenberth and J. D. Milliman (2009). "Changes in Continental Freshwater Discharge from 1948 to 2004." Journal of Climate **22**(10): 2773-2792.

de Rosnay, P., G. Balsamo, C. Albergel, J. Muñoz-Sabater and L. Isaksen (2012). "Initialisation of Land Surface Variables for Numerical Weather Prediction." Surveys in Geophysics **35**(3): 607-621.

Debreu, L., C. Vouland and E. Blayo (2008). "AGRIF: Adaptive grid refinement in Fortran." Computers & Geosciences **34**(1): 8-13.

Decharme, B., C. Delire, M. Minvielle, J. Colin, J. P. Vergnes, A. Alias, D. Saint-Martin, R. Séférian, S. Sénési and A. Voldoire (2019). "Recent Changes in the ISBA-CTRIP Land Surface System for Use in the CNRM-CM6 Climate Model and in Global Off-Line Hydrological Applications." Journal of Advances in Modeling Earth Systems **11**(5): 1207-1252.

Descroix, L., Y. Sané, M. Thior, S.-P. Manga, B. D. Ba, J. Mingou, V. Mendy, S. Coly, A. Dièye, A. Badiane, M.-J. Senghor, A.-B. Diedhiou, D. Sow, Y. Bouaita, S. Soumaré, A. Diop, B. Faty, B. A. Sow, E. Machu, J.-P. Montoroi, J. Andrieu and J.-P. Vandervaere (2020). "Inverse Estuaries in West Africa: Evidence of the Rainfall Recovery?" Water **12**(3).

Durand, F., C. G. Piecuch, M. Becker, F. Papa, S. V. Raju, J. U. Khan and R. M. Ponte (2019). "Impact of Continental Freshwater Runoff on Coastal Sea Level." Surveys in Geophysics **40**(6): 1437-1466.

Durand, F., L. Testut, J. Jouanno and A. C. Fassoni-Andrade (2022). "Role of the amazon outflow on the barotropic tide on the amazonian shelf." Continental Shelf Research **238**.

Failler, P., H. El Ayoubi and A. Konan (2014). Industrie des pêches et de l'aquaculture en Côte d'Ivoire.

Fournier, S., J. T. Reager, H. A. Chandanpurkar, M. Pascolini-Campbell and S. Jarugula (2023). "The Salinity of Coastal Waters as a Bellwether for Global Water Cycle Changes." Geophysical Research Letters **50**(24).

Gévaudan, M., F. Durand and J. Jouanno (2022). "Influence of the Amazon-Orinoco Discharge Interannual Variability on the Western Tropical Atlantic Salinity and Temperature." Journal of Geophysical Research: Oceans **127**(6).

Guimbard, S., N. Reul, R. Sabia, S. Herlédan, Z. E. Khoury Hanna, J.-F. Piollé, F. Paul, T. Lee, J. J. Schanze, F. M. Bingham, D. Le Vine, N. Vinogradova-Shiffer, S. Mecklenburg, K. Scipal and H. Laur (2021). "The Salinity Pilot-Mission Exploitation

Platform (Pi-MEP): A Hub for Validation and Exploitation of Satellite Sea Surface Salinity Data." Remote Sensing **13**(22): 4600.

Harrigan, S., E. Zsoter, L. Alfieri, C. Prudhomme, P. Salamon, F. Wetterhall, C. Barnard, H. Cloke and F. Pappenberger (2020). "GloFAS-ERA5 operational global river discharge reanalysis 1979–present." Earth System Science Data **12**(3): 2043-2060.

[illegible] Schepers (2020). "The ERA5 global reanalysis." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society **146**(730): 1999-2049.

Hilt, M., F. Auclair, R. Benshila, L. Bordois, X. Capet, L. Debreu, F. Dumas, S. Jullien, F. Lemarié, P. Marchesiello, C. Nguyen and L. Roblou (2020). "Numerical modelling of hydraulic control, solitary waves and primary instabilities in the Strait of Gibraltar." Ocean Modelling **151**.

Joyce, R. J., J. E. Janowiak, P. A. Arkin and P. Xie (2004). "CMORPH: A method that produces global precipitation estimates from passive microwave and infrared data at high spatial and temporal resolution." Journal of hydrometeorology **5**(3): 487-503.

[illegible] Averaged Salinity Distribution in Estuaries." Journal of Geophysical Research: Oceans **128**(12).

Lellouche, J.-M., E. Greiner, O. Le Galloudec, G. Garric, C. Regnier, M. Drevillon, M. Benkiran, C.-E. Testut, R. Bourdalle-Badie, F. Gasparin, O. Hernandez, B. Levier, Y. Drillet, E. Remy and P.-Y. Le Traon (2018). "Recent updates to the Copernicus Marine Service global ocean monitoring and forecasting real-[illegible]-resolution system." Ocean Science **14**(5): 1093-1126.

Lellouche, J.-M., E. Greiner, B.-B. Romain, G. Gilles, M. Angélique, D. Marie, B. Clément, H. Mathieu, L. G. Olivier, R. Charly, C. Tony, T. Charles-Emmanuel, G. Florent, R. Giovanni, B. Mounir, D. Yann and L. T. Pierre-Yves (2021). "The Copernicus Global 1/12° Oceanic and Sea Ice GLORYS12 Reanalysis." Frontiers in Earth Science **9**.

Mignot, J., C. de Boyer Montégut, A. Lazar and S. Cravatte (2007). "Control of salinity on the mixed layer depth in the world ocean: 2. Tropical areas." Journal of Geophysical Research **112**(C10).

Mikhailov, V. N. and M. V. Isupova (2008). "Hypersalinization of river estuaries in West Africa." Water Resources **35**(4): 367-385.

Ndoye, S., X. Capet, P. Estrade, E. Machu, L. Kounta, B. Sow, M. Diakhaté and A. T. Gaye (2018). "A numerical modeling study of the Southern Senegal upwelling shelf: Circulation and upwelling source waters." African Journal of Environmental Science and Technology **12**(12): 487-500.

Pagès, J. and J. Citeau (1990). "Rainfall and salinity of a Sahelian estuary between 1927 and 1987." Journal of Hydrology **113**(1-4): 325-341.

Roudier, P., A. Ducharne and L. Feyen (2014). "Climate change impacts on runoff in West Africa: a review." Hydrology and Earth System Sciences **18**(7): 2789-2801.

Ruault, V., J. Jouanno, F. Durand, J. Chanut and R. Benshila (2020). "Role of the Tide on the Structure of the Amazon Plume: A Numerical Modeling Approach." Journal of Geophysical Research: Oceans **125**(2).

[illegible] following [illegible] 227, pp. 3595–3624." Journal of Computational Physics **228**(24): 8985-9000.

Supply, A., J. Boutin, G. Reverdin, J.-L. Vergely and H. Bellenger (2020). Variability of Satellite Sea Surface Salinity Under Rainfall. Satellite Precipitation Measurement: Volume 2. V. Levizzani, C. Kidd, D. B. Kirschbaum et al. Cham, Springer International Publishing**:** 1155-1176.

Tall, A. W., E. Machu, V. Echevin, X. Capet, A. Pietri, K. Corréa, S. M. Sall and A. Lazar (2021). "Variability of Dissolved Oxygen in the Bottom Layer of the Southern Senegalese Shelf." Journal of Geophysical Research: Oceans **126**(5).

Thouvenin-Masson, C., J. Boutin, J.-L. Vergely, G. Reverdin, A. C. Martin, S. Guimbard, N. Reul, R. Sabia, R. Catany and O. Hembise Fanton-[illegible] sea surface salinity uncertainties." Remote Sensing **14**(8): 1878.

Wohl, E. and K. B. Lininger (2022). "Hydrology and discharge." Large Rivers: Geomorphology and Management, Second Edition: 42-75.

Zine, S., J. Boutin, J. Font, N. Reul, P. Waldteufel, C. Gabarro, J. Tenerelli, F. Petitcolin, J.-L. Vergely, M. Talone and S. Delwart (2008). "Overview of the SMOS Sea Surface Salinity Prototype Processor." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **46**(3): 621-645.

870

4) Compléments à la publication : profils verticaux et stratification

a. Analyse de la stratification

On a vu dans la publication présentée ci-dessus qu'il existait une compensation des effets de forçages par l'océan, par entraînement à la base de la couche de mélange. Pour essayer de mieux visualiser cet effet, j'ai étudié les profils verticaux de température et de salinité, ainsi que les profils de stratification (voir section II.10.d pour la méthodologie). J'ai notamment cherché à définir l'impact des variabilités de débits de fleuves sur ces profils. J'ai tracé les différences entre la simulation CROCOisba et la simulation CROCOroclm. Les profils de différence de température et salinité sont présentés dans la Figure V.4, pour les trois anomalies étudiées dans la publication (2011, 2015 et 2018).

En 2011, l'anomalie négative de débits interannuels par rapport aux débits climatologiques est particulièrement forte au mois de septembre (7.10^8 m^3/j). Cette anomalie se traduit en une anomalie positive de salinité de 0.5 pss à la surface qui est rapidement transmise sous la base de la couche de mélange. On n'observe pas d'incidence en termes de température de cette anomalie de débit. On observe une différence négative de salinité liée à une différence négative de température en subsurface au début de la période jusqu'en septembre, ainsi que des anomalies positives de température et de salinité après Avril 2012 dont l'origine n'est pas claire.

En 2015, l'anomalie de débits est en moyenne faible, mais on observe beaucoup plus de variabilité, les débits interannuels arrivant de manière plus saccadée. On observe peu de différences sur les profils de salinité et de température. Une dessalure apparaît après les anomalies positives de débits en septembre, qui reste confinée dans la couche de mélange et s'étend jusque janvier 2016. On n'observe pas d'impact sur la température.

On a le même type de forçages interannuels en 2018, avec une anomalie plutôt positive de runoffs en moyenne et surtout des débits intenses sur des périodes brèves. On observe quelques dessalures restreintes dans la couche de mélange, surtout après le pic important de débit de début septembre. Une anomalie négative importante de salinité accompagnée d'une anomalie positive de température apparaît au début de la période en juin, dont l'origine reste à déterminer. Ce peut être un résidu de l'anomalie de 2017 dont l'effet s'étend sur plusieurs mois.

L'étude de la stratification de la colonne d'eau (Figure V.5) montre un N^2 systématiquement négatif sous la base de la couche de mélange, signifiant une stratification instable, pendant la période marquée par de forts débits et précipitations. L'utilisation d'un forçage de débit interannuel a tendance à systématiquement accentuer cette instabilité, en réduisant encore la

valeur de N^2. Cet effet sur la stratification a lieu quelle que soit l'anomalie moyenne, suggérant qu'il est plutôt le résultat de la variabilité temporelle haute fréquence des débits. Cette accentuation de l'instabilité apparaît à la base des anomalies décrites ci-dessus.

Ces analyses des profils corroborent les résultats évoqués dans la publication, montrant l'effet important des variabilités de débits sur la structure verticale de l'océan de surface.

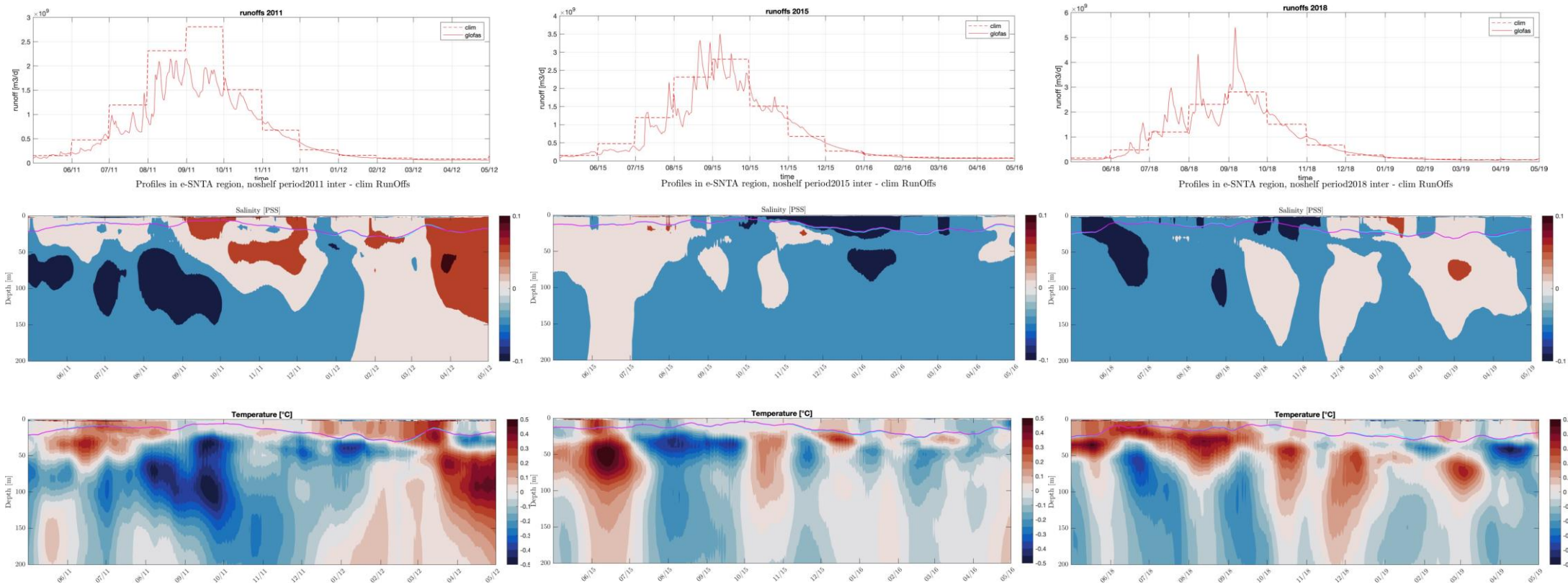


Figure V.4 : Effet des débits fluviaux sur les profils verticaux de salinité et de température : gauche : 2011, milieu : 2015, droite : 2018. Haut : débits (m^3/jour) (interannuels et climatologiques), milieu : profils de différences entre la simulation CROCOglofas et la simulation CROCOroclm en salinité (pss), bas : profils de différences en température (°C). Les lignes magenta représentent la base de la couche de mélange.

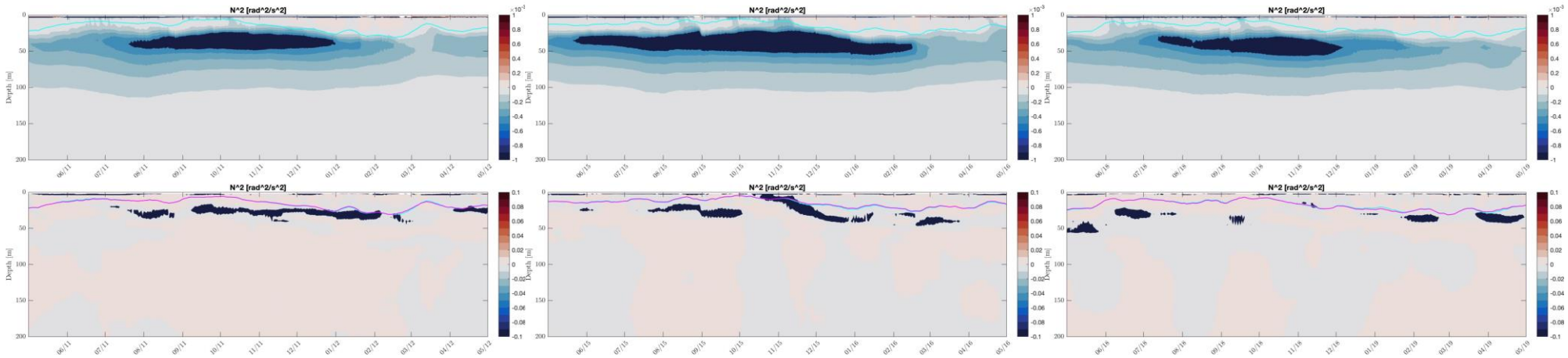


Figure V.5 : stratification verticale des colonnes d'eau : gauche : 2011, milieu : 2015, droite : 2018. Haut : fréquence de Brünt Vaïsala pour les simulations avec débits climatologiques, bas : différences de fréquences de Brünt Vaïsala observées entre la simulation avec débits interannuels et la simulation avec débits climatologiques (interannuels – climatologiques). Noter les différentes échelles de couleur. Les lignes magenta et cyan représentent la base de la couche de mélange.

b. Analyse d'autres régions couvertes par les simulations CROCO

La région couverte par les simulations CROCO est plus vaste que la région e-SNTA étudiée dans la publication. J'ai étudié d'autres sous-régions qu'on a choisi de ne pas insérer dans la publication. Ces régions sont définies dans la Figure V.6, elles ont été choisies pour la diversité des forçages qui régissent la variabilité de la salinité : la région du Nord-Ouest est une région très peu sujette aux apports d'eau douce et dépendant principalement de l'évaporation. La région du Sud-Ouest est quant à elle le lieu de fortes précipitations saisonnières liées à la présence de l'ITCZ. Nous avons choisi de ne pas étudier la région Nord-Est, qui est sujette au même type de forçages que la région Nord-Ouest, mais où les données de SSS satellitaires sont impactées par la présence de RFI et de plusieurs îles, ce qui ne permet pas la validation des simulations.

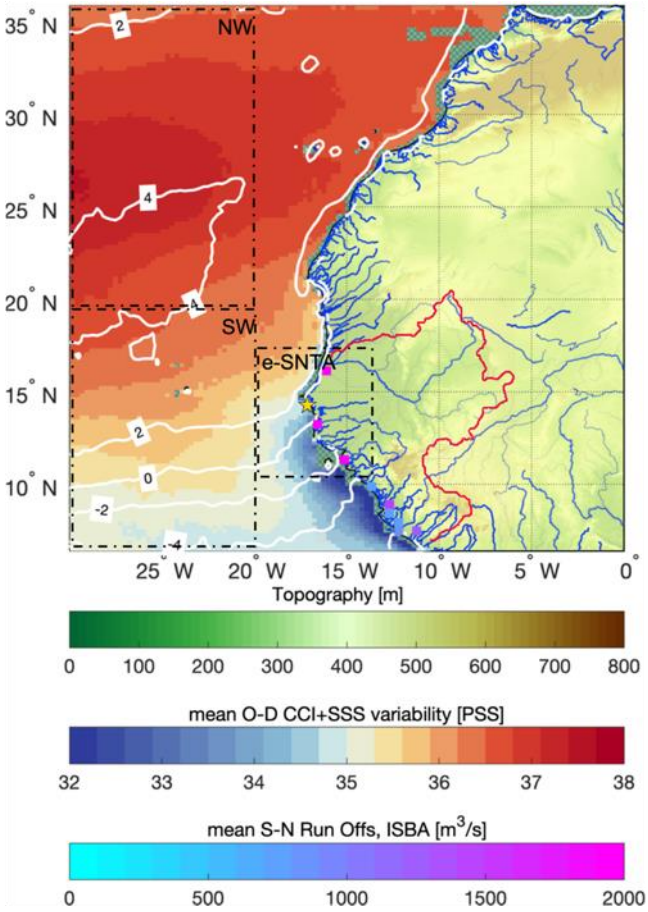


Figure V.6 : carte de la région simulée par CROCO. Définition des régions nord-ouest (NW), sud-ouest (SW) et e-SNTA. Voir la Figure 1 de la publication pour une description détaillée des champs représentés sur cette figure.

La Figure V.7 montre les cycles saisonniers de la SSS et des termes de l'équation de bilan de salinité dans la couche de mélange, calculés dans les trois régions choisies, on peut en déduire les principaux phénomènes qui s'y déroulent.

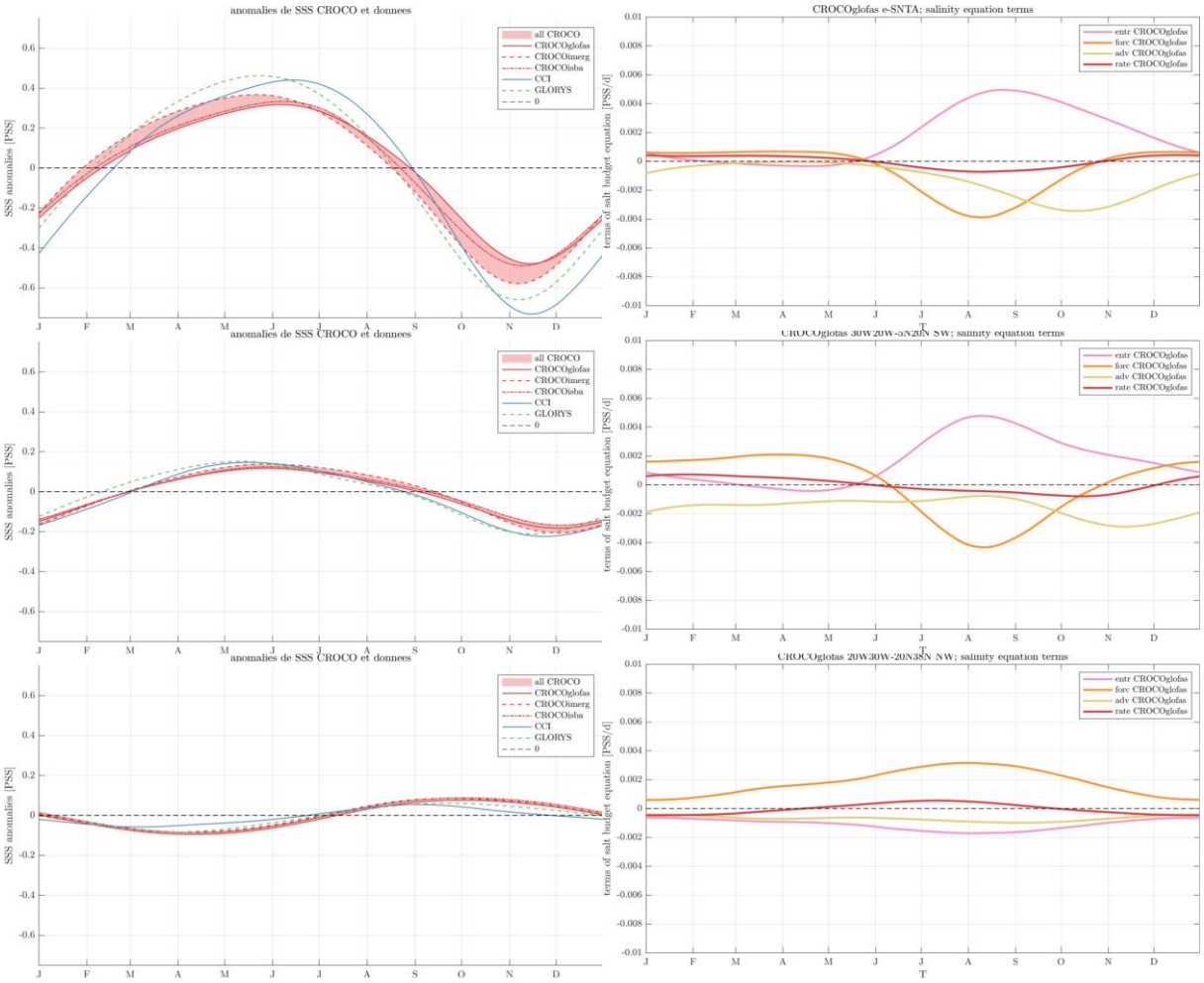


Figure V.7 : Cycles saisonniers de la SSS dans les trois régions étudiées : haut : région e-SNTA, milieu : région Sud-Ouest, bas : région Nord-Ouest. Gauche : salinités climatologiques après avoir retiré le biais moyen. CCI (bleu), GLORYS (vert), simulations CROCO (rouge). Droite : termes de l'équation de bilan de la salinité, forçage (orange), advection, comprenant les flux des rivières (jaune) et entraînement (rose), tendance en salinité (rouge) pour la simulation CROCOglofas.

- **Région e-SNTA :**

Je rappelle ici la description donnée dans la publication. Dans cette région la climatologie est gouvernée par l'effet des précipitations pendant la saison des pluies en été. Les pluies accumulées sur le continent à cette même période engendrent un écoulement d'eau par les fleuves, qui met entre 1 et 2 mois à atteindre la mer. Le maximum d'intensité de débit est atteint en septembre octobre. On observe ainsi une baisse de salinité sur une période continue du début de la saison des pluies. Ces deux effets génèrent un fort gradient vertical de salinité à la base de la couche mélangée, et une augmentation de la profondeur de la couche de mélange. L'océan

atténue cet apport d'eau douce par de l'advection verticale et un entraînement de l'eau dessalée vers l'intérieur de l'océan. De Janvier à Mai, le forçage est légèrement positif (évaporation) et associé à une couche de mélange plus fine (moins de turbulences liées au forçage). Pendant cette période on observe un fort apport de sel par advection verticale, qui correspond à un phénomène d'upwelling connu pour être particulièrement marqué en mars. Cet apport d'eau est systématiquement redistribué par advection horizontale, notamment par un transport d'Ekman vers l'Ouest.

- **Région Sud-Ouest :**

La région Sud-Ouest est saisonnièrement traversée par l'ITCZ, le forçage atmosphérique change donc de signe entre une période d'intenses précipitations entre Juin et Octobre, et une période d'évaporation le reste de l'année. L'océan agit en atténuant les perturbations atmosphériques, notamment par le biais du terme d'entrainement qui compense presque entièrement les échanges avec l'atmosphère. En automne, l'ITCZ se déplace progressivement vers le sud, et les eaux fraiches sont advectées du sud par transport d'Ekman de direction NW. Cette advection est particulièrement importante en automne, plus forte que l'évaporation, ce qui engendre une baisse de la salinité moyenne de la couche de mélange. L'évaporation redevient le terme dominant en décembre, et la salinité augmente à nouveau.

- **Région Nord-Ouest :**

Dans la région Nord-Ouest le terme de forçage atmosphérique est toujours positif, traduisant la rareté des précipitations au-dessus de 20°N et la constante prédominance de l'évaporation, en particulier pendant l'été. Dans cette région, à l'inverse des régions du sud, le gradient de salinité à la base de la couche de mélange est négatif, signifiant que la couche de mélange est plus salée que l'océan profond, ce qui est explicable par l'importante et constante évaporation. La couche de mélange est particulièrement épaisse, atteignant 100 m pendant l'hiver. L'océan a ici aussi un rôle d'atténuation et de propagation des effets de l'atmosphère vers le fond, donc un effet de baisse constante de salinité, à l'inverse des autres régions. L'advection a également tendance à réduire la quantité de sel dans la couche de mélange, et ce particulièrement en été alors que l'ITCZ est proche de la limite sud de la région et que les eaux dessalées qui en découlent sont advectées vers le nord par courant d'Ekman. On observe dans ces régions un cycle saisonnier beaucoup moins marqué que dans les régions sud, et un décalage de l'ordre d'un mois entre les cycles du modèle et ceux des observations. Les champs satellitaires ont également un cycle saisonnier moins fort que le modèle.

La Figure V.8 représente les anomalies interannuelles, moyennées sur des périodes de 3 mois, pour les trois régions étudiées.

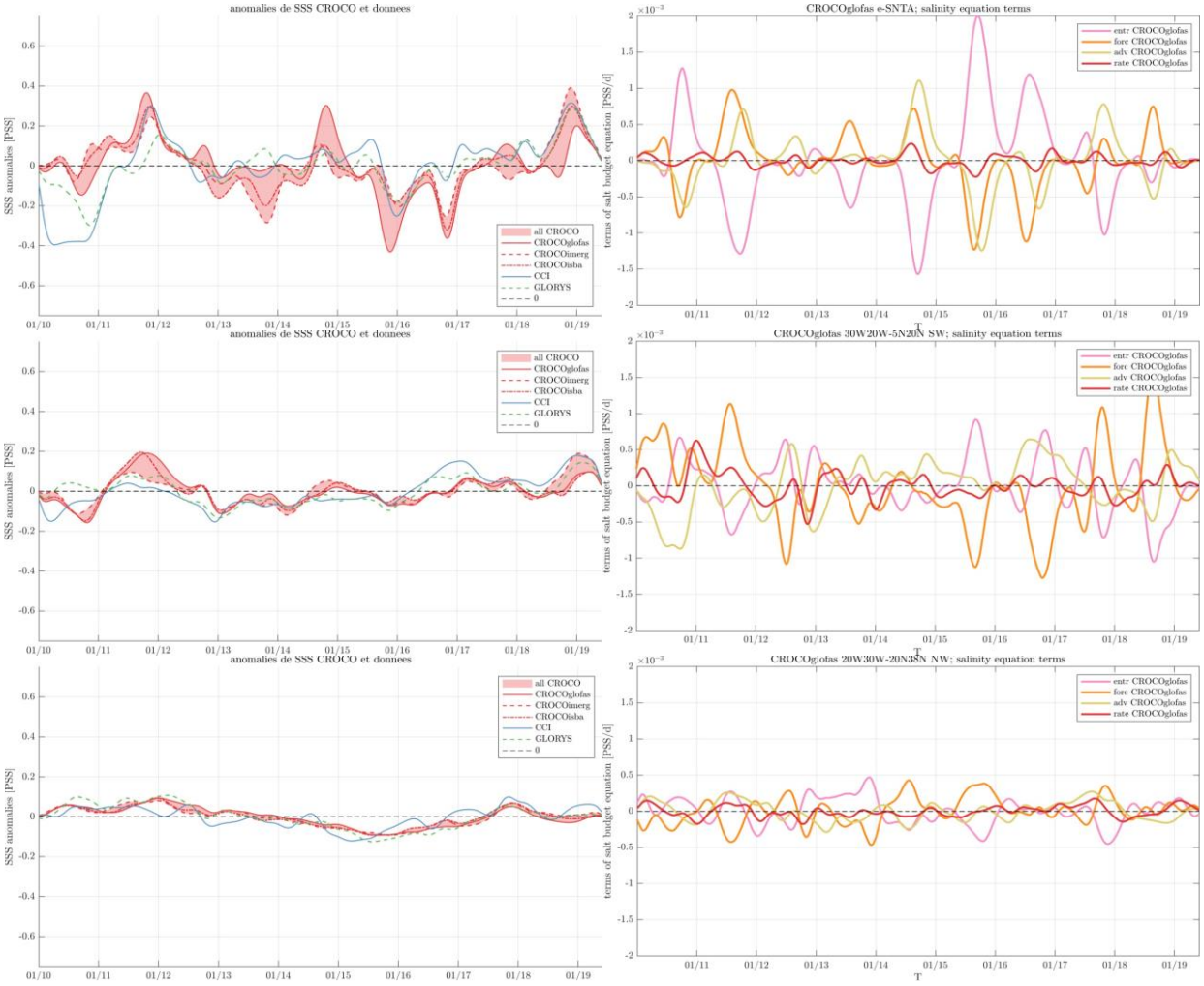


Figure V.8 : Anomalies interannuelles de la SSS dans les trois régions étudiées : haut : région e-SNTA, milieu : région Sud-Ouest, bas : région Nord-Ouest. Gauche : salinités climatologiques après avoir retiré le biais moyen. CCI (bleu), GLORYS (vert), simulations CROCO (rouge). droite : termes de l'équation de bilan de la salinité, forçage (orange), advection, comprenant les flux des rivières (jaune) et entraînement (rose), tendance en salinité (rouge) pour la simulation CROCOglofas.

En comparaison à la région e-SNTA, les anomalies des régions Sud-Ouest et Nord-Ouest sont moins importantes. Elles atteignent au maximum 0.2 pour la région SW et 0.1 pour la région NW. On observe également moins de disparité entre les différentes versions de simulations CROCO, mises à part les anomalies de fin 2011 et fin 2018 sur la région SW, caractérisées par des différences importantes entre les précipitations IMERG et ERA5. Les anomalies de la région NW ont une échelle temporelle plus large, on observe une diminution générale de la salinité du début de la période à 2016 puis une augmentation jusqu'en 2018. Sur ces deux régions, les anomalies des SSS simulées sont en bon accord avec les anomalies des SSS

observées par satellite et simulées par GLORYS, même si, sur la région SW, l'anomalie de 2011 semble légèrement surévaluée et l'anomalie de fin 2016 sous-évaluée. L'origine des anomalies est difficile à définir sur les régions SW et NW. Les anomalies de précipitation et d'évaporation semblent en grande partie compensées par l'entraînement, et les anomalies de tendance en salinité semblent être surtout reliées à des anomalies du terme d'advection. Dans ces régions, le terme d'advection est nettement moins corrélé au terme de forçage atmosphérique, car il ne contient pas d'apports fluviaux directement dans la région. Une analyse plus précise, telle que celle développée dans la publication, serait nécessaire pour connaître plus précisément la contribution de chaque terme.

5) Problématique de la simulation avec précipitations climatologiques

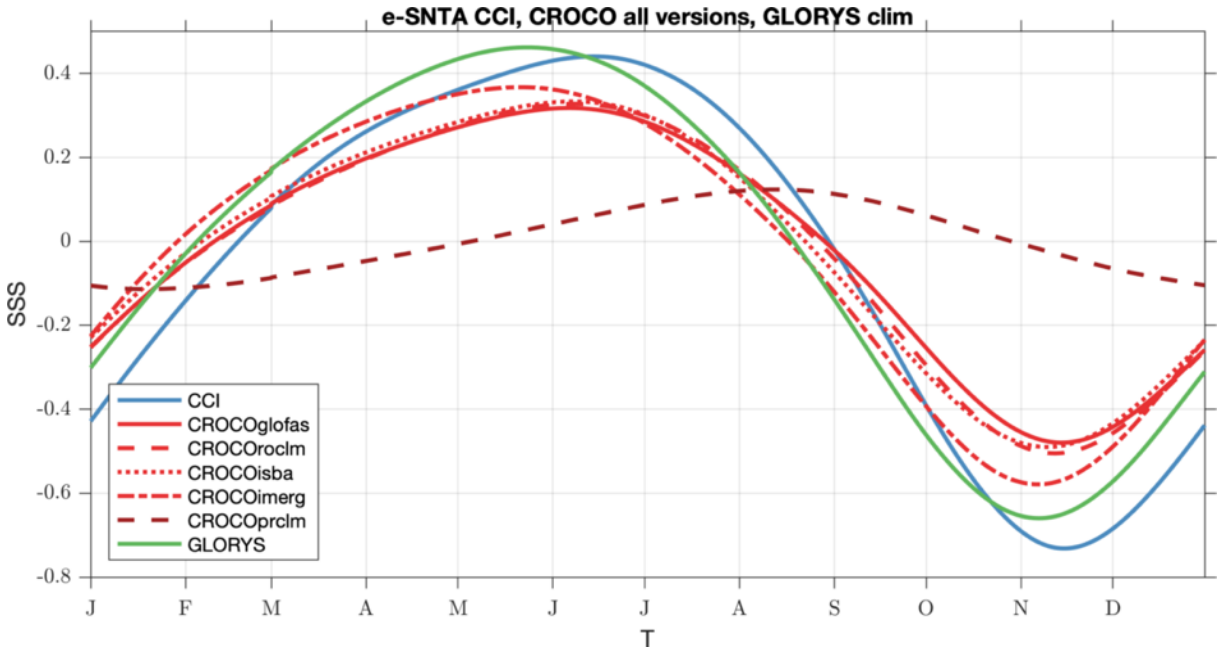


Figure V.9 : Climatologie de salinité des différentes simulations CROCO, de la simulation GLORYS et des données CCI sur la région e-SNTA. La simulation utilisant le champ de précipitations climatologique est en rouge foncé (CROCOprclm).

Dans la publication, j'ai cherché à comparer l'effet des anomalies interannuelles de débits fluviaux à l'effet des anomalies interannuelles de précipitations sur la salinité. Pour cela nous avons mis en place une climatologie de précipitations (section II.5). Cette climatologie crée des champs de précipitations dont la variabilité spatiale et temporelle est totalement différente d'un champ de précipitation naturel, et les effets obtenus sur la salinité sont nettement moindres que ceux obtenus avec un champ interannuel, la simulation obtenue n'est pas réaliste. Sur la Figure

V.9, on voit que le cycle saisonnier de salinité est beaucoup moins fort avec la simulation CROCOprclm.

Pour étudier l'impact de la variabilité d'intensité des précipitations, il serait plus réaliste de créer une 'climatologie' qui conserve la variabilité à fine échelle des précipitations.

6) Conclusion

J'ai étudié la variabilité de la salinité de la couche de mélange dans la région d'Afrique du Nord-Ouest, sujette à des apports importants d'eau douce par les précipitations et par les débits de fleuves. J'ai identifié les liens entre la variabilité de la salinité et la variabilité des apports d'eau douce : proche de la côte la salinité de surface est au premier ordre dépendante du cycle saisonnier de forçages d'eau douce. Les anomalies de ces forçages peuvent avoir des effets plus ou moins marqués sur la salinité. En termes de précipitation, l'effet n'est pas linéaire : de fortes anomalies, des évènements de pluies particulièrement intenses engendrent une anomalie en salinité ; par contre, de faibles anomalies de précipitations sont totalement et rapidement compensées par l'entraînement à la base de la couche de mélange, et ont un impact limité sur la salinité de surface. Les anomalies de débits ont quant à elle un effet plus systématique sur la salinité de surface, car elles ne sont jamais entièrement absorbées par l'entraînement, et toujours avec un délai de plusieurs semaines. Leur effet est bien sûr relié à l'intensité de l'anomalie interannuelle des débits, mais également à la circulation globale, en particulier aux courants de surface qui propagent le panache d'eau dessalée vers le large et diffuse l'anomalie de salinité sur une région plus vaste. Les anomalies de forçage se répercutent sur la stratification de la colonne d'eau, les forçages interannuels ont tendance à systématiquement déstabiliser l'océan de surface.

VI. Conclusion

Mes travaux ont permis d'améliorer la caractérisation de la variabilité de la salinité. Sa prise en compte aux échelles non résolues par les mesures satellitaires actuelles permet une estimation beaucoup plus précise des sources d'incertitude lors des validations des données satellitaires. Les échelles de la variabilité spatiotemporelle de la SSS simulées avec des modèles haute résolution démontrent qu'une part importante de la variabilité de la SSS est manquée par les mesures satellitaires actuelles, notamment à moyennes et hautes latitudes, mais pourrait être captée par des mesures satellitaires à plus haute résolution ayant un rapport signal sur bruit similaire à celui de SMOS. A basse latitude, les champs satellitaires actuels, combinés à des simulations numériques m'ont permis de caractériser et d'interpréter les sources de variabilité de la SSS au large de l'Afrique du Nord-Ouest, en lien avec la variabilité des flux d'eau douce. Je développe ci-après ces conclusions et décrirai les perspectives ouvertes par l'ensemble de ce travail dans la section suivante.

1) Il est important de prendre en compte la variabilité de la SSS sous les échelles d'intégration des données satellitaires lors de leur validations à partir de comparaisons à des mesures *in situ*. La variabilité de la SSS est particulièrement significative dans les régions de fronts océaniques, de panaches de fleuves et de fortes précipitations. J'ai mis au point une méthode de validation prenant en compte les erreurs de représentativité des mesures satellitaires et *in situ*. Cette méthode permet de valider les SSS mais aussi leurs incertitudes inversées à partir des mesures satellitaires. L'application de cette méthode sur les données CCI a montré que les incertitudes fournies dans les champs CCI sont globalement cohérentes avec les validations à partir des observations, avec cependant une surestimation des incertitudes dans la région de l'Amazone. Sur la période SMOS-SMAP (après 2015), les incertitudes liées à l'échantillonnage participent à 33 % et 14 % des incertitudes totales pour les champs mensuel et hebdomadaires respectivement. Sur la période SMOS seul (avant 2012), les incertitudes fournies dans les champs CCI sont surestimées, notamment dans l'océan Sud.

2) L'analyse des spectres spatio-temporels de la SSS à partir de modèles haute résolution a révélé qu'une grande partie de la puissance des fluctuations se trouve dans la mésoéchelle, mais avec des variations significatives d'une région à l'autre. Dans certaines zones, notamment à des latitudes moyennes comme le Gulf Stream et le Rio De La Plata, les spectres présentent une puissance significative à une échelle de 15 km, similaire à ce qui a été observé dans la région de l'Amazone à une échelle de 50 km. Cela suggère qu'une résolution améliorée grâce

à des instruments comme SMOS-HR/FRESH permettrait de capter beaucoup de fluctuations de mésoéchelle et de sub-mésoéchelle dans ces régions.

3) La variabilité de la salinité dans la couche de mélange dans la région de l'upwelling du Sénégal – Mauritanie est associée aux apports d'eau douce significatifs provenant à la fois des précipitations atmosphériques et des débits de cours d'eau. À proximité des côtes, la salinité en surface est principalement régie par les cycles saisonniers des apports d'eau douce, mais également par leur variabilité interannuelle. Les variations de SSS ne sont pas du tout proportionnelles aux taux de précipitations ; des précipitations exceptionnellement intenses sont associées à des anomalies de salinité marquées. En revanche, des anomalies de faible amplitude sont rapidement compensées par un processus d'entraînement à la base de la couche de mélange, et leur impact sur la salinité en surface demeure limité. Les variations de débits de fleuves ne sont que partiellement compensées par l'entraînement de la couche de mélange et ont un impact sur la SSS lié non seulement à l'intensité des anomalies de débit, mais également à la dynamique océanique qui propagent dans certaines conditions les dessalures vers le large. Ces anomalies de forçage ont également un impact sur la stratification de la colonne d'eau, en tendant à déstabiliser la couche supérieure de l'océan.

VII. Perspectives

1) Généralisation de la méthode de validation

La méthode de validation des données satellitaires de SSS tenant compte des incertitudes liées à l'erreur de représentativité a permis de mettre en évidence des possibilités d'amélioration dans les champs satellitaires CCI. On a observé une surestimation des incertitudes et un biais négatif sur la mesure satellitaire pendant les années 2010-2012, marquées par de nombreuses RFI contaminant le signal satellitaire. On a également constaté un problème dans la région du panache de l'Amazone, avec deux simulations ayant des résolutions spatiales différentes. Il serait intéressant d'étudier plus en profondeur l'origine de cette surestimation des incertitudes. Plusieurs hypothèses pourraient être testées. Les erreurs sur les données auxiliaires (SST, vent) spécifiées dans l'algorithme d'inversion de la SSS semblent parfois surestimées et vont être modifiées dans un futur retraitement des données SMOS. Cette surestimation de l'incertitude pourrait également provenir d'une surestimation des erreurs sur la mesure radiométrique. De plus, les champs CCI sont obtenus à partir d'une analyse objective temporelle au sein de laquelle on spécifie des variabilités *a priori* de la SSS dérivées soit de simulations GLORYS soit des observations satellitaires elles même, qu'il est difficile de valider. Mes résultats suggèrent que certains champs de variabilité pourraient être trop faible dans les régions de faible variabilité et dans l'océan Austral. Concernant le biais moyen global négatif observé en 2010-2011, il pourrait provenir de résidus de contaminations par les RFIs très nombreuses à cette période. Une étude est en cours (Bonjean et al. 2023, en préparation) pour caractériser et corriger les signatures sur les SSS des contaminations RFIs. Ces nouveaux champs pourront être validés avec la méthode de validation que j'ai développée. Enfin la méthode que j'ai employée fait l'hypothèse d'une distribution gaussienne des incertitudes, il serait intéressant de quantifier l'effet de cette hypothèse sur les résultats par exemple à partir de tests académiques. Plus généralement, cette méthode peut être appliquée à la validation d'autres champs de SSS satellitaires. Il est donc intéressant de la généraliser, et son introduction dans la plateforme de validation du Pi-Mep est en cours.

2) Compléter l'étude spectrale

La méthode spectrale que j'ai développée en section 4 a fourni des résultats sur la variabilité de la SSS qu'il serait possible de capter avec de nouvelles missions satellitaires à haute résolution, et sur les résolutions spatio-temporelles idéales qu'il faudrait atteindre avec ces futures missions. Il serait possible de rendre cette étude plus réaliste, par exemple en ajoutant un bruit sur la mesure ou en sous-échantillonnant la SSS simulée avec un scénario d'orbite donné.
Par ailleurs, on pourrait étendre ce type d'analyses spectrales à d'autres variables, par exemple la température et la densité, afin d'aborder les processus thermohalins qui ont lieu dans l'océan à différentes échelles spatio-temporelles, mettant possiblement en évidence des phénomènes de compensations des effets de la salinité et de la température.

3) Étude du Sénégal

L'étude dans la région de l'upwelling du Sénégal – Mauritanie permet de mieux comprendre les variabilités de la SSS dans cette région côtière, et de comparer les effets des différents forçages et de leurs anomalies sur la salinité. Cette relation est fortement liée à la géométrie de la côte et à la circulation générale. Il serait intéressant d'étendre ce type d'étude sur d'autres régions impactées par d'importants flux d'eau douce, pour comparer les effets obtenus.
Je me suis particulièrement intéressé à l'influence de la variabilité des débits de fleuves dans ce travail. La simulation avec précipitations climatologiques n'étant pas réaliste et fournissant des salinités très éloignées de la réalité, je n'ai pas pu regarder en détails le rôle de la variabilité des précipitations. Il est envisagé de poursuivre l'étude en améliorant le champ de précipitations climatologiques pour qu'il conserve une variabilité fine échelle similaire.
Ce travail montre la possibilité d'utiliser les données satellitaires comme référence de validation de SSS simulées, avec maintenant 14 ans de mesures ininterrompues. Dans cette thèse j'ai dû me restreindre à des régions non polluées par les RFI, qui sont importantes près des côtes marocaines. La correction de ces effets par la méthode développée par Bonjean et al., (en préparation) permettra de s'affranchir de cette limitation et d'étendre ce genre de validation à toutes les régions côtières.
Ces validations sont cependant encore limitées par la résolution des mesures satellitaires, qui ne permettent pas de s'approcher à moins de 50 km des côtes. On pourrait se poser la question de l'utilisation conjointe de données de salinité et de données altimétriques qui permettent

d'atteindre de très bonnes résolutions et de s'approcher des côtes, avec notamment la nouvelle mission SWOT, d'autant que j'ai montré que la relation entre champ de SSS et courants de surface n'était pas du tout évidente du fait des processus de subsurface, suggérant le besoin des deux types de mesure pour bien comprendre l'origine et le devenir des dessalures.
L'étude présentée dans ce manuscrit se concentre sur l'effet des variations de flux d'eau douce sur la salinité. On pourrait poursuivre ce travail en étudiant plus en détail d'autres variables. Par exemple, on pourrait s'intéresser à la formation de couches barrières qui auraient un impact sur la température des eaux de surface, ou bien sur un éventuel effet des forts débits sur la hauteur d'eau.
On pourrait également s'intéresser plus en détail au biais de SSS et de SST simulées dans le nord de la région, et déterminer leur origine.

4) Futures missions radiométriques en bande L

L'ensemble des études présentées dans ce manuscrit montrent l'intérêt des mesures satellitaires de SSS actuelles et le potentiel de mesures satellitaires de SSS à haute résolution. Au-delà d'une meilleure résolution, les futures missions dédiées à l'observation de la SSS sont cruciales pour assurer la continuité des mesures.

Si SMOS et SMAP ne tombent pas en panne dans les 5 prochaines années, la continuité des mesures de SSS devrait être assurée par la mission Copernicus Image Microwave Radiometer (CIMR, (Kilic et al. 2018)), dont le lancement est prévu vers 2028-2030. Cette mission à large bande de fréquences (bandes L, C et X) permettra de mesurer simultanément la SSS, la SST et le vent, ce qui permettra de réduire les incertitudes liées aux données auxiliaires dans le processus d'inversion de la SSS. CIMR devrait donc permettre d'inverser des SSS plus précises et moins contaminées par les RFIs, mais avec une résolution spatiale de ~60 km, soit une résolution spatiale un peu dégradée par rapport aux mesures actuelles.

Or une meilleure résolution spatiale est nécessaire afin de réduire les erreurs de représentativité lors des comparaisons satellite *in situ*, de capter des signaux de mésoéchelle ou de sub-mésoéchelle aux hautes latitudes, très énergétiques dans les spectres de salinité, de mieux observer l'effet des précipitations très variables spatialement, et de s'approcher des côtes. Des recherches sur de nouveaux radiomètres interférométriques ont été entreprises via le projet

SMOS-HR soutenu par le CNES et ont amené à la soumission de la mission Fine Resolution Explorer for Salinity, Carbon and Hydrology (FRESCH, (Rodríguez-Fernández et al., 2023, en préparation)) en réponse à l'appel d'offre Earth Explorer 12 de l'ESA. FRESCH a pour ambition de succéder à SMOS en améliorant la résolution spatiale des mesures à environ 10 km en gardant une précision radiométrique similaire (entre 0.1 pss et 0.2 pss au large, entre 0.2 pss et 1 pss près des côtes). Les mesures seront prises avec un temps de revisite de 1 à 3 jours, en fonction de la latitude. Cet instrument fonctionne de manière assez similaire à SMOS, en captant les émissions en bande L. Ses buts principaux sont de permettre l'observation de la SSS dans les régions côtières et proches de la glace et de détecter les structures de mésoéchelle dans l'océan grâce à sa résolution améliorée. Il est également proposé de tirer parti des mesures de SSS pour améliorer la caractérisation de la pression partielle de CO_2 à la surface des océans.

Annexe 1 : distributions de la SSS à différentes échelles : skewness et kurtosis

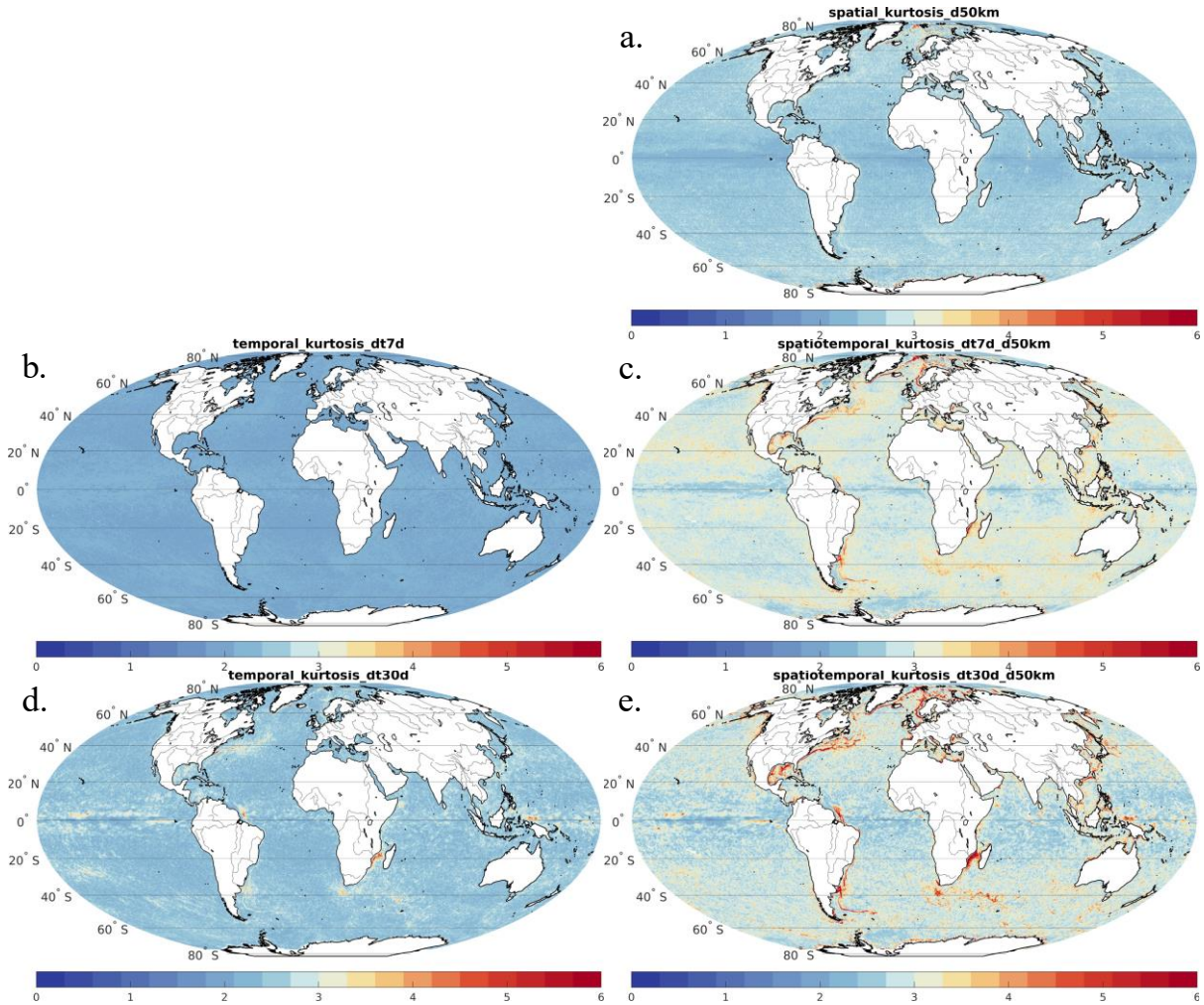


Figure 1 : Champs de kurtosis de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles : a. dans 50 km 1 jour, b. ponctuelle sur 7 jours, c. dans 50 km sur 7 jours, d. ponctuelle sur 30 jours, e. sur 50 km et 30 jours.

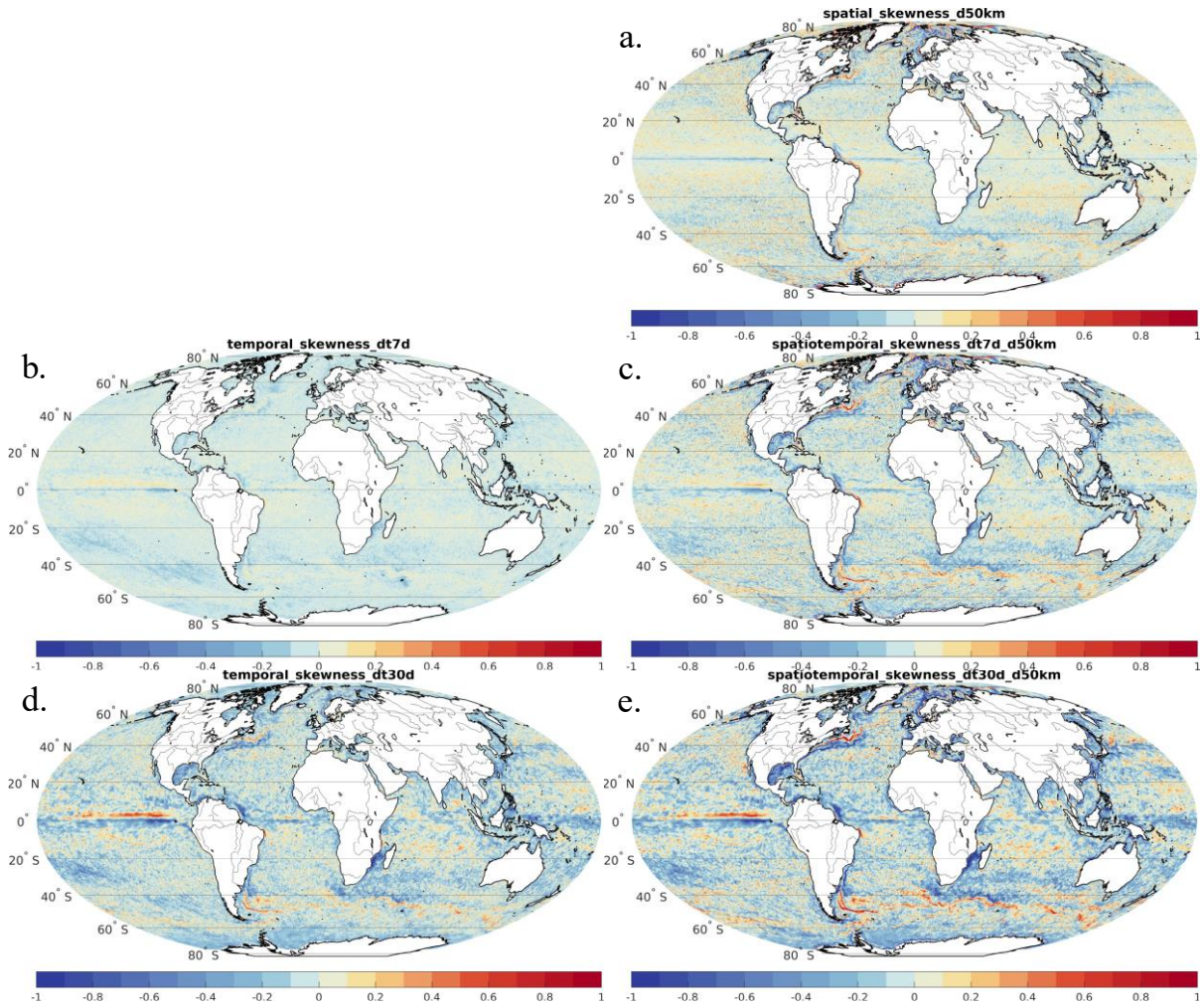


Figure 2 : Champs de skewness de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles : a. dans 50 km 1 jour, b. ponctuelle sur 7 jours, c. dans 50 km sur 7 jours, d. ponctuelle sur 30 jours, e. sur 50 km et 30 jours.

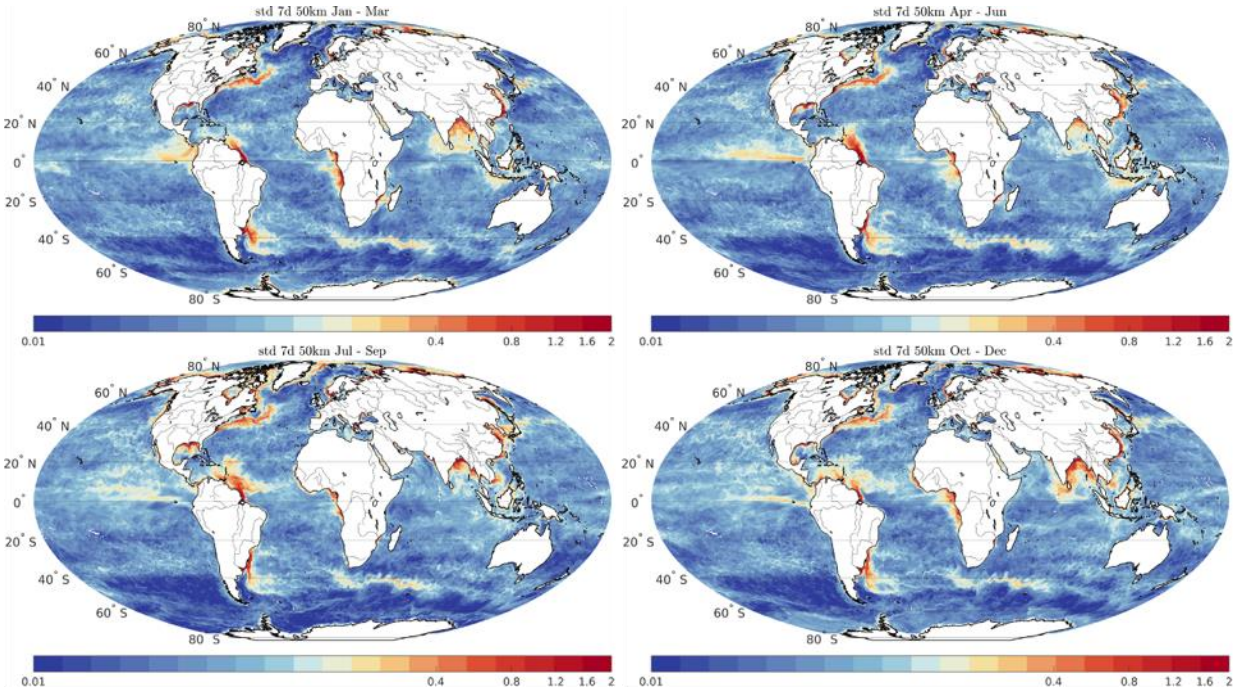


Figure 3 : variation saisonnière de la variabilité de la SSS dans des boîtes de 50 km 7 jours : (a) Janvier – Mars. (b) Avril – Juin. (c) Juillet – Septembre. (d) Octobre – Décembre.

Annexe 2 : Méthodes infructueuses de détection des courants de surface en utilisant les fronts de SSS

Dans cette annexe, je présente une étude qui n'a pas abouti mais qui a représenté une part importante de mon travail de thèse. J'ai cherché à corréler le déplacement des fronts de salinité de surface observés par satellite à la propagation des panaches de fleuves par la méthode de Maximum de Cross Corrélation (MCC).

1) Méthode

La partie V.2) montre une corrélation marquée entre les run-offs de fleuves et les dessalures dans la région du Sénégal, qui semble montrer une propagation vers le large des eaux peu salées venant de la côte. J'ai donc voulu étudier cette propagation et voir si on pouvait en déduire des courants d'advection.

Pour cela, je me suis appuyé sur des méthodes d'estimation de courants de surface par la SST, initiées par (Emery et al. 1986). Deux méthodes ont été étudiées pour cette problématique, la première consistant à inverser l'équation de température pour déduire une valeur de l'advection, la deuxième, une méthode plus centrée sur le traitement d'images, est la méthode de Maximum de Cross-Corrélation (MCC).

Cette méthode consiste à comparer deux champs de température séparés d'un intervalle T, et à chercher pour des fenêtres de taille choisie dans le 1er champ, la corrélation maximale dans le 2ème champ. Cela permet de détecter un déplacement le plus probable des différentes fenêtres entre le 1er et le 2ème temps d'observation.

Il a été montré que les deux méthodes donnent des résultats très similaires dans le cas de la SST, mais la deuxième méthode est nettement plus simple à mettre en œuvre et nécessite moins de temps de calcul. Pour cette raison je me suis uniquement intéressé à la méthode de MCC pour application à la SSS. Une description détaillée de cette méthode adaptée à la SSS est donnée ci-dessous, et décrite dans la Figure 1.

La méthode de MCC nécessite de fixer plusieurs paramètres en fonction des phénomènes étudiés.

- Taille de la fenêtre : elle dépend essentiellement de la taille des structures qui peuvent se déplacer en se conservant sur le pas de temps choisi. Elle doit être suffisamment fine pour donner des valeurs précises de courant, tout en étant plus large que la taille typique des structures océaniques. J'ai utilisé des fenêtres de 200km de côté, le rayon de Rossby variant dans cette région de 60km à 100km.
- Pas de temps T entre deux champs : le choix du pas de temps dépend de la vitesse moyenne de déplacement des structures, et de la faculté des structures de SSS à maintenir leur géométrie entre 2 pas de temps. T doit être suffisamment grand pour qu'il y ait un déplacement d'un pixel au moins, sinon aucun déplacement ne sera détecté, et suffisamment court pour que la structure reste cohérente. J'ai utilisé des pas de temps variables, de 1 à 15 jours.
- Taille de la région de recherche de MCC : pour limiter le temps de calcul, j'ai restreint la région de recherche du maximum de cross-corrélation dans le 2ème pas de temps. Il faut cependant que cette fenêtre reste assez large pour permettre de détecter d'éventuels forts courants. J'ai donc une largeur d'environ 780km, permettant un courant de surface de 0.3m/s sur 15 jours, qui est supérieur à 99,8 % des valeurs d'advection horizontale du modèle.
- Seuil de valeur de corrélation : un seuil sur la valeur de corrélation obtenue entre les deux fenêtres est appliqué, qui dépend du déplacement obtenu : plus le déplacement est grand, plus le seuil est élevé. J'ai utilisé une fonction logarithmique (cf Figure 1) pour fixer la valeur de ce seuil. Un test sur la cohérence des courants obtenus est également appliqué : les maximas locaux de corrélation les plus importants et dont la valeur est au-dessus du seuil décrit ci-dessus sont sélectionnés, et on préfère celui qui donne un déplacement le plus en adéquation avec le résultat obtenu pour les fenêtres voisines.

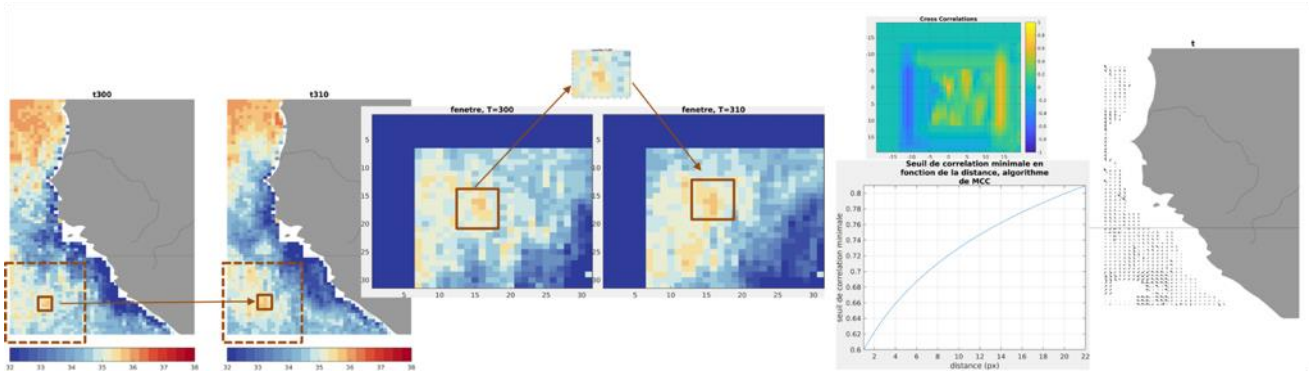


Figure 1: Description de la méthode de recherche des courants d'advection horizontale de surface par la méthode de Maximum de Cross-Corrélation : à gauche : entre deux pas de temps, on cherche la corrélation des structures en SSS. Milieu : on cherche le maximum de corrélation sur des fenêtres de tailles choisies, en permettant des translations selon les latitudes et les longitudes. Droite : on obtient des valeurs de corrélations dépendant de ces translations, dont on sélectionne la valeur maximale, que l'on filtre en fonction de la valeur de corrélation et de la distance parcourue entre les deux pas de temps avec une fonction logarithmique. On obtient des champs d'advection horizontale probables.

2) Résultats

Les résultats obtenus ne sont pas totalement satisfaisants au regard des courants simulés par le modèle CROCO : la méthode de MCC pour la détection de courants de surface à partir de la SSS donne uniquement des résultats cohérents dans certaines régions, aux endroits où il existe des fronts bien marqués, ce qui n'est pas systématique (voir Figure 2).

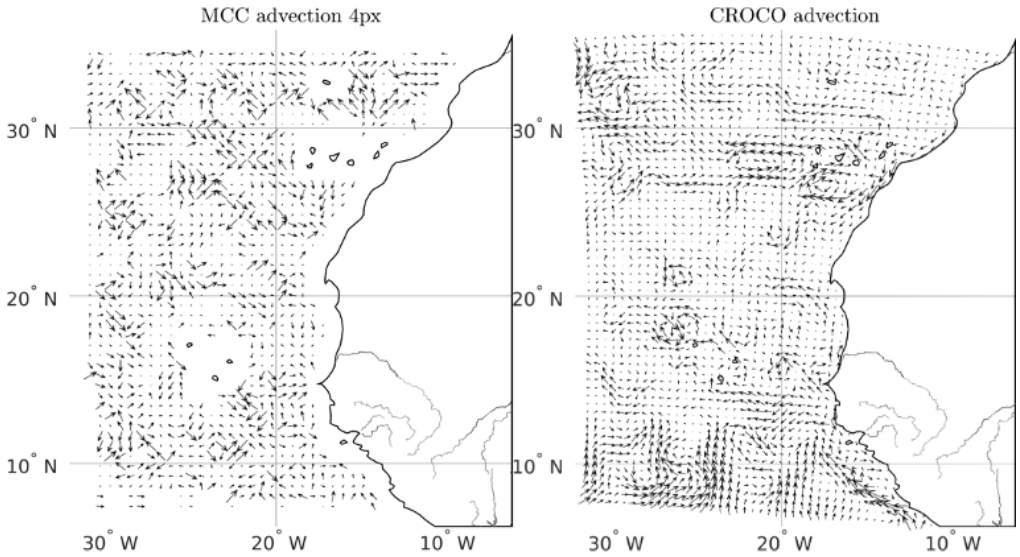


Figure 2: Résultats de la méthode de MCC pour les courants de surface et comparaison au champ de courant correspondant issu du modèle CROCO, exemple du 16/11/2016.

Une autre source d'erreur dans cette méthode provient d'une hypothèse de départ, qui stipule que les termes verticaux sont petits par rapport aux termes d'advection horizontale. Ce n'est cependant pas le cas, comme on peut le voir sur l'exemple de la Figure 3, où les termes horizontaux et verticaux sont de même ordre et ont tendance à se compenser.

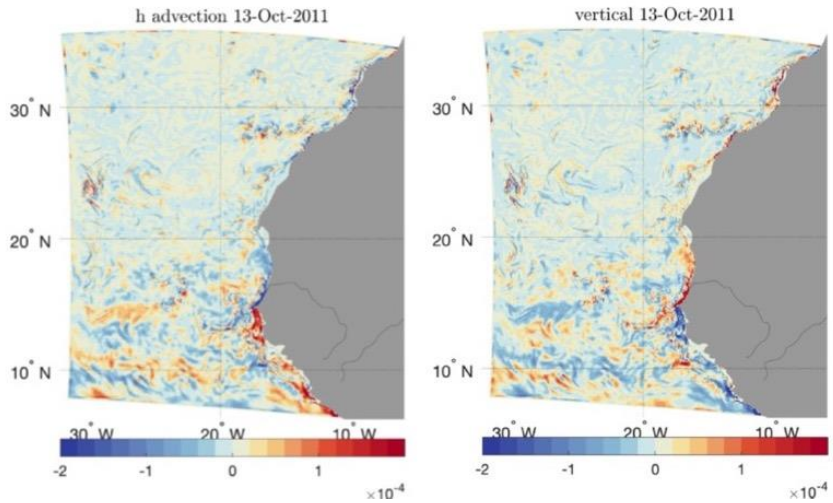


Figure 3: Comparaison des valeurs d'advection horizontale et des termes verticaux dans le modèle CROCO, exemple du 13 Octobre 2011

Bilan carbone de la thèse

Au LOCEAN, une politique de réduction de l'emprunte carbone liée à la recherche a été menée ces dernières années, à l'initiative du groupe de travail Climaction. (https://climactions.ipsl.fr/groupes-de-travail/locean-climactions/ et https://labos1point5.org). Cette démarche a abouti à la mise en place d'un quota carbone annuel, qui devrait atteindre progressivement 2 tCO_2e par personne, chaque agent devant systématiquement déclarer le coût carbone de ses déplacements.

Ma thèse s'est déroulée en partie pendant la période covid, ce qui a fortement réduit mon emprunte carbone pendant la première année où toutes les conférences se sont déroulées à distance. La principale source d'émissions pendant ma thèse est liée à la campagne en mer PIRATA-FR32. Les croisières océanographiques représentent en effet des émissions estimées à 300 l de carburant/personne, équivalent à 1 tCO_2e par jour de mer et par personne. Pour une croisière de 40 jours (du 15 février 2021 au 12 avril 2021), et le retour en avion de Las Palmas à Paris (2763 km, 600 $kgCO_2e$), cette croisière représente 40,6 tCO_2e.

La deuxième source d'émissions concerne ma participation physique à deux conférences – workshops. L'aller-retour à la conférence salinité à New York correspond à 11674 km et 1750 $kgCO_2e$. Ma participation au workshop OHIS à côté de Niort (aller-retour en train) représente 703 km pour 3 $kgCO_2e$.

Les émissions liées à mon trajet domicile-travail sont nulles, ayant fait tous mes déplacements à vélo à de très rares exceptions près, sans achat de vélo neuf.

Le quotidien au laboratoire compte pour 180 $kgCO_2e$ par an pour le bâtiment, 172 $kgCO_2e$ par an pour le chauffage et 122 $kgCO_2e$ par an pour l'électricité, donc un total de 1564 $kgCO_2e$ pour 3 ans et 3 mois de thèse. Les repas représentent entre ~1 $kgCO_2e$ pour un repas végétarien, et ~10 $kgCO_2e$ pour un repas composé de bœuf, j'estime mon émission quotidienne moyenne à 3 $kgCO_2e$ et donc à ~2400 $kgCO_2e$ sur la durée de la thèse.

Enfin, l'utilisation d'un ordinateur portable représente 169 $kgCO_2e$.

En tout, ma thèse a donc représenté 46,48 tCO_2e, en très grande partie due à la campagne en mer. Un graphique représentant la répartition des émissions est présenté ci-dessous.

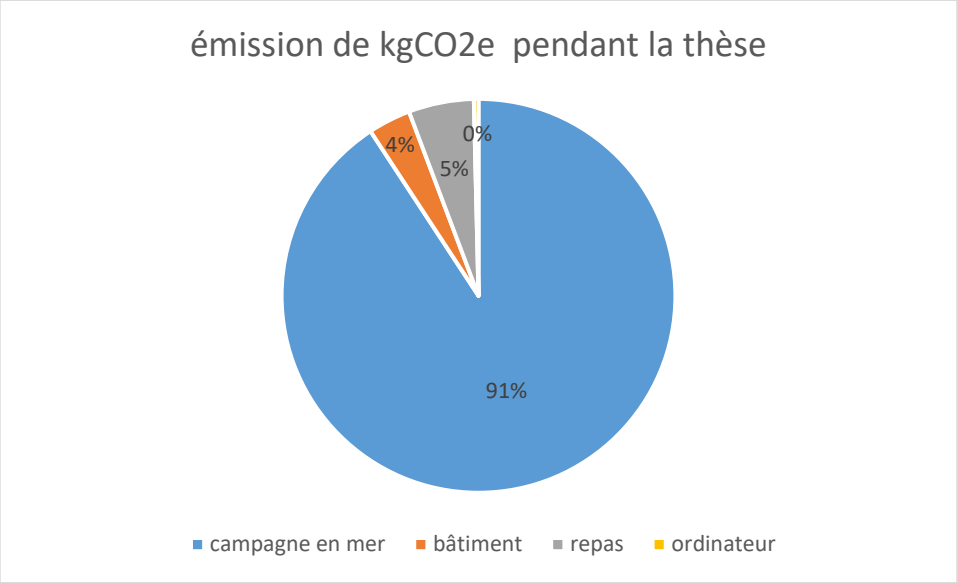


Figure 1: émissions de carbone équivalent pendant la thèse.

Table des illustrations

Figure I.1 : La circulation thermohaline (Talley 2013). Violet : océan supérieur et thermocline. Rouge : thermocline plus dense et eaux intermédiaires. Orange : eaux profondes de l'océan Indien et du Pacifique. Vert : eaux profondes de l'Atlantique Nord. Bleu : eaux de fond de l'Antarctique. Gris : composantes du détroit de Béring et apports de la Méditerranée et de la mer Rouge. La largeur des flèches indique leur intensité. 19

Figure I.2 : Droite : exemple de diagramme T-S dans l'Atlantique aux points décrits sur la carte de gauche, permettant de détecter les masses d'eau (Fieux 2017) NASTW : North Atlantic Subtropical Water, NACW : North Atlantic Central Water, SASTW : South Atlantic Subtropical Water, SACW : South Atlantic Central Water, AAIW : Antarctic Intermediate Water. 21

Figure I.3 : Description des réservoirs d'eau (a) et des différents flux composant le cycle de l'eau (b), tiré de (Masson-Delmotte et al. 2021). 22

Figure I.4 : Répartition de la SSS moyenne en pss (couleurs) et du terme E-P moyen en m/an (contours) (Gordon et al. 2015). 23

Figure I.5 : Moyenne zonale du terme E-P et de la SSS (Pickard 1964). 23

Figure I.6 : Données in situ disponibles au mois de Juillet 2023 (tiré de ocean-ops.org). 28

Figure I.7 : profondeurs de prise de mesures pour les différents instruments mesurant la salinité.ASIP : Air–Sea Interaction Profiler; SSP : Surface Salinity Profile; STS : Surface Tempertaure Salinity sensor; TSG : Thermosalinographes 29

Figure I.8 : les différentes missions d'observation de la SSS depuis l'espace, et la couverture temporelle des données. 31

Figure I.9 : Échelles spatiotemporelles des différents processus océaniques (Dickey and Bidigare 2007, Supply 2020) 34

Figure II.1 : sensibilité de la permittivité de l'eau de mer à la SSS, pour une SST de 20°C (Dinnat 2003). Gauche : partie réelle, Droite : partie imaginaire. 39

Figure II.2 : Les différentes pollutions du signal mesuré par les radiomètres en bande L (adapté de Reul et al. (2020)). 41

Figure II.3 : dépendance de la permittivité de l'océan à la SST à certaines valeurs fixes de SSS (gauche) et à la SSS à certaines valeurs fixes de SST (droite), d'après le modèle proposé par Klein and Swift (1977). 42

Figure II.4 : Schéma récapitulatif de l'algorithme permettant de générer les champs CCI hebdomadaires et mensuels à partir des mesures individuelles SMOS, SMAP et Aquarius (Boutin et al. 2021). 47

Figure II.5 : Champ de SSS CCI moyenné sur l'année 2017 (haut) et champ d'erreurs associées (bas), en pss. 50

Figure II.6 : Nombre de flotteurs argo disponibles entre 2010 et 2020, dans des boîtes de 1°x1° (issu de la plateforme Pi-Mep). 52

Figure II.7 : Données de TSG entre 1993 et 2021, mises à disposition par le SNO-SSS 54

Figure II.8 : Carte représentant les différentes bouées du réseau PIRATA, dans l'Atlantique tropical (www.brest.ird.fr/pirata/pirata.php) 55

Figure II.9 : Photographie de la bouée Melax. 56

Figure II.10 : Plan de campagne PIRATA-FR32, issu du site www.brest.ird.fr/pirata/pirata_cruises.fr. 57

Figure II.11 : une des bouées PIRATA déployées pendant la campagne. 58

Figure II.12 : la rosette, constituée de la CTD et de bouteilles Niskin, déployée à proximité de la côte de l'île de Sainte-Hélène. 59

Figure II.13 : Résultats des mesures de (a) courant, (b) température, (c) salinité et (d) dioxygène dissout, par les profils CTD le long de la radiale 10°W. SEUC : South Equatorial UnderCurren ; sCEC : South Equatorial Current ; EUC : Equatorial Uncer Current. Figures issues du rapport de mission PIRATA-FR32 (https://www.brest.ird.fr/pirata/pirata_cruises_fr). 60

Figure II.14 : Comparaison des mesures du TSG du Thalassa pendant la mission PIRATA-FR32 aux mesures SMOS colocalisées, en pss. En haut, de gauche à droite : mesures TSG, mesures SMOS colocalisées, et différence entre les deux (SMOS – TSG). En bas : série temporelle des mesures du TSG (rouge) et des mesures SMOS colocalisées (bleu). 61

Figure II.15 : Profileur Argo et bouée dérivante déployés pendant la campagne PIRATA-FR32. 62

Figure II.16 : Points d'entrée de débits de fleuves dans la simulation CROCO. La couleur représente le débit moyen entre 2010 et 2019, en m^3/s. 66

Figure II.17 : Courants de surface en m/s, le 23/05/2018, simulés par GIGATL (https://github.com/Mesharou/GIGATL). 68

Figure II.18 : Diagramme des différents composants permettant l'estimation et la prévision des débits fluviaux par le modèle GloFAS (Harrigan et al. 2020). 70

Figure II.19 : Graphique issu de (Decharme et al. 2019), décrivant le modèle ISBA et les différents flux d'eau simulés. 72

Figure II.20 : Comparaison des débits dans les rivières de la côte de l'Afrique de l'ouest, en m^3/s. (haut) débit du fleuve Sénégal, (milieu) débit du fleuve Gambie et des rivières avoisinantes, (bas) débit cumulé de toutes les rivières de la région. Les courbes bleues représentent les débits GloFAS, les courbes rouges les débits ISBA. 74

Figure II.21 : Distribution des forçages de précipitations ERA5 (à gauche) et IMERG (au milieu) et du forçage climatologique de précipitations utilisé dans la simulation CROCOprclm (à droite). Précipitations moyennes entre 2010 et 2019 (en haut), écart-type des précipitations sur la même période (en bas). Ces cartes sont données en m/jour. 78

Figure II.22 : Histogramme des champs de précipitations ERA5 (rouge), IMERG (bleu) et climatologiques utilisés dans la simulation CROCOprclm (vert), en m/jour. Les échelles sont logarithmiques. 78

Figure II.23 : Exemple de colocalisation de mesures de TSG. La mesure originale (en noir) subit un lissage (rouge) et est ensuite comparée aux pixels satellites traversés. 82

Figure II.24 : vision en 2 dimensions de la colocalisation d'un champ donné sur une grille (+) à des mesures de TSG. 83

Figure II.25 : colocalisations CCI - SSS mesurées par les TSG en Afrique de l'Ouest. Le trajet faux présentant un biais négatif des données in situ part du large du Cap blanc vers le Nord-Ouest. 83

Figure II.26 : Schéma montrant le calcul de la variabilité de la SSS entre l'échelle satellitaire et l'échelle de la simulation GLORYS, ainsi que la variabilité en 1 dimension, et le calcul d'anisotropie. 85

Figure II.27 : variabilité de la SSS dans 50 km et 7 jours en pss, estimée à l'aide de la simulation GLORYS, moyennée sur 2010 – 2020. Échelle logarithmique. 86

Figure II.28 : Spectre de puissance de la salinité provenant de D'Addezio et al. (2019) utilisé pour extrapoler la variabilité subpixel jusqu'à l'échelle d'un km. 87

Figure II.29 : Comparaison des variabilités unidirectionnelles calculées à l'aide de la simulation GLORYS aux variabilités des TSG : a) carte des différences, b) histogramme des variabilités GLORYS (rouge) et TSG (bleu) à l'échelle globale, c) idem dans les régions variables (Gulf Stream, Amazone et Congo). 89

Figure III.1 : Champs de variabilité de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles, en pss : a. variabilité à une dimension (voir Figure II.26 pour une définition), b. dans 50 km 1 jour, c. ponctuelle sur 7 jours, d. dans 50 km sur 7 jours, e. ponctuelle sur 30 jours, f. sur 50 km et 30 jours. 101

Figure III.2 : Histogramme des variabilités de la SSS calculées sous différentes échelles spatiotemporelles décrites Figure III.1, en pss. Les axes sont en échelle logarithmiques pour clarifier la lecture. 101

Figure III.3: Nuages de points comparant les variabilités de la SSS GLORYS sous différentes échelles, seuls les scatterplot montrant de bonnes corrélations ont été montrées (r2> 0.85). Les échelles colorées sont logarithmiques, elles représentent le nombre de points en puissance de 10. Gauche : 50 km 7 jours versus 50 km 1 jour, Milieu : 50 km 30 jours versus ponctuelle 30 jours, Droite : une dimension sur 50 km versus deux dimensions sur 50 km. Les abscicces et ordonnées sont données en pss. 103

Figure III.4 : Hovmöller de la variabilité de la SSS GLORYS sous 50 km 30 jours sur l'année 2016, en pss. 103

Figure III.5 : résumé graphique de la publication : gauche : comparaison des échantillonnages in situ et satellitaires, et incertitudes qui en découlent (bas). Droite : distribution des différences réduites par les incertitudes, avec ou sans l'incertitude liée à l'échantillonnage. 105

Figure III.6 : Validation des SSS CCI v3.4 hebdomadaires et de leurs incertitudes dans la région de l'Amazone, avec des incertitudes liées aux différences d'échantillonnages calculées à partir de la simulation APLUME36 : distribution des différences CCI - Argo réduites par la somme des incertitudes, sans prendre en compte l'échantillonnage (rouge) et en prenant en compte l'échantillonnage (bleu). En noir, la courbe à atteindre si les incertitudes sont bien représentées. 127

Figure III.7 : Validation des SSS CCI v3.4 hebdomadaires et de leurs incertitudes dans la région de l'upwelling du Sénégal-Mauritanie, avec des incertitudes liées aux différences d'échantillonnages calculées à partir de la simulation GLORYS (haut) et CROCO (bas). Les courbes sont décrites Figure III.6. Les cartes représentent (gauche) la moyenne quadratique des incertitudes liées aux diférences d'échantillonnage (Umis) sur des pixels de 1°, (milieu) les différences CCI – Argo réduites en prenant en compte Umis, (droite) en haut le nombre de points argo dans chaque boîte, et en bas les différences CCI – Argo sans prendre en compte Umis. 128

Figure III.8 : Validation des données CCI v3.2 hebdomadaires sur l'océan global, et sur différentes périodes : a. entre 2010 et 2020, b. sur la période SMOS seul, c. sur la période SMOS

Aquarius, d. sur la période SMOS SMAP. Voir la figure 4 de la publication ci-dessus pour une description des courbes. 129

Figure III.9 : idem que Figure III.8 pour la version 4.4 des champs CCI. 131

Figure III.10 : cartes des écart-types des distributions des différences SSS satellite - SSS argo réduites par la somme quadratique des incertitudes, dans des pixels de 2°, pour les périodes (a) 2010 - 2020, (b) SMOS seul, (c) SMOS Aquarius, (d) SMOS SMAP. 133

Figure IV.1 : région étudiée de la simulation APLUME36. Le fond de carte représente la variabilité de la SSS en pss, en échelle logarithmique. On s'intéresse ici à la boîte de gauche (boîte 1), située au niveau du panache de l'Amazone. 138

Figure IV.2 : spectres dans le plan (fr,ft) des SSS APLUME36, en Janvier Février Mars (gauche) et Juillet Août Septembre (droite). 139

Figure IV.3 : Spectres dans l'espace (haut) et dans le temps (bas) des SSS APLUME36 pour Janvier à Mars (gauche) et Juillet à Septembre (droite). 140

Figure IV.4 : région étudiée de la simulation GIGATL. Le fond de carte représente la variabilité de la SSS en pss, en échelles logarithmiques. 141

Figure IV.5 : spectres dans le plan (fr,ft). Gauche : Janvier Février Mars, droite : Juillet Août Septembre. (a, b) Gulf Stream, (c,d) Amazone, (e,f) rio de la Plata, (g,h) région sub tropicale. Les spectres (couleurs) sont en échelle logarithmique, ainsi que les axes. 143

Figure IV.6 : Spectres dans l'espace (gauche) et dans le temps (droite), pour les différentes régions de la simulation GIGATL et les différentes saisons. 144

Figure V.1 : Hovmöllers de SSS (haut) et d'anomalies de SSS (bas), entre 300 et 500km des côtes (gauche), entre 150km et 300km (milieu) et à moins de 150km (droite). Figures données en pss. 146

Figure V.2 : Run-offs des fleuves issus de GloFAS, en m^3/jour : climatologie des run-offs moyens (haut) ; série temporelle des débits (gris : fleuves individuels, rouge : débit moyen) (milieu) ; anomalies mensuelles de débit (bas). 147

Figure V.3 : Corrélations entre les débits et les dessalures, en fonction d'un décalage en temps (abscisses) et d'un décalage en latitude (ordonnées) pour les CCI, entre 0 et 150 km de la côte (a.), entre 150 et 300 km (b.) ; et le modèle CROCO entre 0 et 150 km de la côte (c.), entre 150 et 300 km (d.). 148

Figure V.4 : Effet des débits fluviaux sur les profils verticaux de salinité et de température : gauche : 2011, milieu : 2015, droite : 2018. Haut : débits (m^3/jour) (interannuels et climatologiques), milieu : profils de différences entre la simulation CROCOglofas et la simulation CROCOroclm en salinité (pss), bas : profils de différences en température (°C). Les lignes magenta représentent la base de la couche de mélange. 193

Figure V.5 : stratification verticale des colonnes d'eau : gauche : 2011, milieu : 2015, droite : 2018. Haut : fréquence de Brünt Vaïsala pour les simulations avec débits climatologiques, bas : différences de fréquences de Brünt Vaïsala observées entre la simulation avec débits interannuels et la simulation avec débits climatologiques (interannuels – climatologiques). Noter les différentes échelles de couleur. Les lignes magenta et cyan représentent la base de la couche de mélange. 194

Figure V.6 : carte de la région simulée par CROCO. Définition des régions nord-ouest (NW), sud-ouest (SW) et e-SNTA. Voir la Figure 1 de la publication pour une description détaillée des champs représentés sur cette figure. 195

Figure V.7 : Cycles saisonniers de la SSS dans les trois régions étudiées : haut : région e-SNTA, milieu : région Sud-Ouest, bas : région Nord-Ouest. Gauche : salinités climatologiques après avoir retiré le biais moyen. CCI (bleu), GLORYS (vert), simulations CROCO (rouge). Droite : termes de l'équation de bilan de la salinité, forçage (orange), advection, comprenant les flux des rivières (jaune) et entraînement (rose), tendance en salinité (rouge) pour la simulation CROCOglofas. 196

Figure V.8 : Anomalies interannuelles de la SSS dans les trois régions étudiées : haut : région e-SNTA, milieu : région Sud-Ouest, bas : région Nord-Ouest. Gauche : salinités climatologiques après avoir retiré le biais moyen. CCI (bleu), GLORYS (vert), simulations CROCO (rouge). droite : termes de l'équation de bilan de la salinité, forçage (orange), advection, comprenant les flux des rivières (jaune) et entraînement (rose), tendance en salinité (rouge) pour la simulation CROCOglofas. 198

Figure V.9 : Climatologie de salinité des différentes simulations CROCO, de la simulation GLORYS et des données CCI sur la région e-SNTA. La simulation utilisant le champ de précipitations climatologique est en rouge foncé (CROCOprclm). 199

Figure 1 : Champs de kurtosis de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles : a. dans 50 km 1 jour, b. ponctuelle sur 7 jours, c. dans 50 km sur 7 jours, d. ponctuelle sur 30 jours, e. sur 50 km et 30 jours. 207

Figure 2 : Champs de skewness de la SSS à différentes échelles spatiotemporelles : a. dans 50 km 1 jour, b. ponctuelle sur 7 jours, c. dans 50 km sur 7 jours, d. ponctuelle sur 30 jours, e. sur 50 km et 30 jours. 208

Figure 3 : variation saisonnière de la variabilité de la SSS dans des boîtes de 50 km 7 jours : (a) Janvier – Mars. (b) Avril – Juin. (c) Juillet – Septembre. (d) Octobre – Décembre. 209

Figure 1: Description de la méthode de recherche des courants d'advection horizontale de surface par la méthode de Maximum de Cross-Corrélation : à gauche : entre deux pas de temps, on cherche la corrélation des structures en SSS. Milieu : on cherche le maximum de corrélation sur des fenêtres de tailles choisies, en permettant des translations selon les latitudes et les longitudes. Droite : on obtient des valeurs de corrélations dépendant de ces translations, dont on sélectionne la valeur maximale, que l'on filtre en fonction de la valeur de corrélation et de la distance parcourue entre les deux pas de temps avec une fonction logarithmique. On obtient des champs d'advection horizontale probables. 211

Figure 2: Résultats de la méthode de MCC pour les courants de surface et comparaison au champ de courant correspondant issu du modèle CROCO, exemple du 16/11/2016. 212

Figure 3: Comparaison des valeurs d'advection horizontale et des termes verticaux dans le modèle CROCO, exemple du 13 Octobre 2011 212

Figure 1: émissions de carbone équivalent pendant la thèse. 214

Table des tableaux

Tableau 1 : Composition du sel de mer, en pourcentage. 14

Tableau 2 : superficie de drainage et débit moyen des plus grands fleuves mondiaux et des deux principaux fleuves d'Afrique de l'Ouest (Wohl and Lininger 2022). 25

Tableau 3 : paramétrisation des forçages des différentes simulations. 66

Tableau 4 : résultat des validations des salinités CCI v3.2 hebdomadaires et mensuelles sur différentes régions et différentes périodes. Les chiffres représentent l'écart type des distributions des différences réduites par l'incertitude sur la mesure satellitaire seule (Usat), les incertitudes Usat et l'incertitude liée à la différence d'échantillonnage, sans étendre vers les fines échelles Umis_glo, et Usat et Umis, étendu jusqu'aux échelles de 1 km. Les chiffres en gras correspondent aux cas les plus proches de la valeur idéale de 1. 130

Tableau 5 : idem que Tableau 4 pour la version 4.4 des champs CCI. 132

Bibliographie

Alory, G., T. Delcroix, P. Téchiné, D. Diverrès, D. Varillon, S. Cravatte, Y. Gouriou, J. Grelet, S. Jacquin, E. Kestenare, C. Maes, R. Morrow, J. Perrier, G. Reverdin and F. Roubaud (2015). "The French contribution to the voluntary observing ships network of sea surface salinity." Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers **105**: 1-18.

Arkin, P. A. and B. N. Meisner (1987). "The relationship between large-scale convective rainfall and cold cloud over the western hemisphere during 1982-84." Monthly Weather Review **115**(1): 51-74.

Beck, H. E., A. I. Van Dijk, V. Levizzani, J. Schellekens, D. G. Miralles, B. Martens and A. De Roo (2017). "MSWEP: 3-hourly 0.25 global gridded precipitation (1979–2015) by merging gauge, satellite, and reanalysis data." Hydrology and Earth System Sciences **21**(1): 589-615.

Bingham, F. M., S. Brodnitz, S. Fournier, K. Ulfsax, A. Hayashi and H. Zhang (2021). "Sea surface salinity subfootprint variability from a global high-resolution model." Remote Sensing **13**(21): 4410.

Bingham, F. M., S. D. Howden and C. J. Koblinsky (2002). "Sea surface salinity measurements in the historical database." Journal of Geophysical Research: Oceans **107**(C12): SRF 20-21-SRF 20-10.

Blumen, W. (1978). "Uniform potential vorticity flow: Part I. Theory of wave interactions and two-dimensional turbulence." Journal of the Atmospheric Sciences **35**(5): 774-783.

Bourlès, B., R. Lumpkin, M. J. McPhaden, F. Hernandez, P. Nobre, E. Campos, L. Yu, S. Planton, A. Busalacchi, A. D. Moura, J. Servain and J. Trotte (2008). "The Pirata Program." Bulletin of the American Meteorological Society **89**(8): 1111-1126.

Boutin, J., Y. Chao, W. E. Asher, T. Delcroix, R. Drucker, K. Drushka, N. Kolodziejczyk, T. Lee, N. Reul, G. Reverdin, J. Schanze, A. Soloviev, L. Yu, J. Anderson, L. Brucker, E. Dinnat, A. Santos-Garcia, W. L. Jones, C. Maes, T. Meissner, W. Tang, N. Vinogradova and B. Ward (2016). "Satellite and In Situ Salinity: Understanding Near-Surface Stratification and Subfootprint Variability." Bulletin of the American Meteorological Society **97**(8): 1391-1407.

Boutin, J., N. Martin, X. Yin, J. Font, N. Reul and P. Spurgeon (2012). "First assessment of SMOS data over open ocean: Part II—Sea surface salinity." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **50**(5): 1662-1675.

Boutin, J., N. Reul, J. Koehler, A. Martin, R. Catany, S. Guimbard, F. Rouffi, J. L. Vergely, M. Arias, M. Chakroun, G. Corato, V. Estella-Perez, A. Hasson, S. Josey, D. Khvorostyanov, N. Kolodziejczyk, J. Mignot, L. Olivier, G. Reverdin, D. Stammer, A. Supply, C. Thouvenin-Masson, A. Turiel, J. Vialard, P. Cipollini, C. Donlon, R. Sabia and S. Mecklenburg (2021). "Satellite-Based Sea Surface Salinity Designed for Ocean and Climate Studies." Journal of Geophysical Research: Oceans **126**(11): e2021JC017676.

Boutin, J., N. Reul, J. Koehler, A. Martin, R. Catany, S. Guimbard, F. Rouffi, J. L. Vergely, M. Arias, M. Chakroun, G. Corato, V. Estella-Perez, A. Hasson, S. Josey, D. Khvorostyanov, N. Kolodziejczyk, J. Mignot, L. Olivier, G. Reverdin, D. Stammer, A. Supply, C. Thouvenin-Masson, A. Turiel, J. Vialard, P. Cipollini, C. Donlon, R. Sabia and S. Mecklenburg (2021). "Satellite-Based Sea Surface Salinity Designed for Ocean and Climate Studies." Journal of Geophysical Research: Oceans **126**(11).

Boutin, J., J.-L. Vergely, E. P. Dinnat, P. Waldteufel, F. D'Amico, N. Reul, A. Supply and C. Thouvenin-Masson (2021). "Correcting Sea Surface Temperature Spurious Effects in Salinity Retrieved From Spaceborne L-Band Radiometer Measurements." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **59**(9): 7256-7269.

Boutin, J., J.-L. Vergely, E. P. Dinnat, P. Waldteufel, F. D'Amico, N. Reul, A. Supply and C. Thouvenin-Masson (2020). "Correcting sea surface temperature spurious effects in salinity retrieved from spaceborne L-band radiometer measurements." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **59**(9): 7256-7269.

Boutin, J., J. L. Vergely, S. Marchand, F. D'Amico, A. Hasson, N. Kolodziejczyk, N. Reul, G. Reverdin and J. Vialard (2018). "New SMOS Sea Surface Salinity with reduced systematic errors and improved variability." Remote Sensing of Environment **214**: 115-134.

Boutin, J., S. Yueh, R. Bindlish, S. Chan, D. Entekhabi, Y. Kerr, N. Kolodziejczyk, T. Lee, N. Reul and M. Zribi (2023). "Soil Moisture and Sea Surface Salinity Derived from Satellite-Borne Sensors." Surveys in Geophysics **44**(5): 1449-1487.

Brainerd, K. E. and M. C. Gregg (1995). "Surface mixed and mixing layer depths." Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers **42**(9): 1521-1543.

Burek P, V. D. K. J., De Roo A. (2013). LISFLOOD - Distributed Water Balance and Flood Simulation Model - Revised User Manual 2013.

Callies, J. and R. Ferrari (2013). "Interpreting Energy and Tracer Spectra of Upper-Ocean Turbulence in the Submesoscale Range (1–200 km)." Journal of Physical Oceanography **43**(11): 2456-2474.

Carmack, E. C. (2007). "The alpha/beta ocean distinction: A perspective on freshwater fluxes, convection, nutrients and productivity in high-latitude seas." Deep Sea Research Part II: Topical Studies in Oceanography **54**(23-26): 2578-2598.

Carton, J. A. and B. S. Giese (2008). "A reanalysis of ocean climate using Simple Ocean Data Assimilation (SODA)." Monthly weather review **136**(8): 2999-3017.

Chandanpurkar, H. A., T. Lee, X. Wang, H. Zhang, S. Fournier, I. Fenty, I. Fukumori, D. Menemenlis, C. G. Piecuch, J. T. Reager, O. Wang and J. Worden (2022). "Influence of Nonseasonal River Discharge on Sea Surface Salinity and Height." Journal of Advances in Modeling Earth Systems **14**(2).

Chelton, D. B., R. A. DeSzoeke, M. G. Schlax, K. El Naggar and N. Siwertz (1998). "Geographical variability of the first baroclinic Rossby radius of deformation." Journal of Physical Oceanography **28**(3): 433-460.

Chelton, D. B., S. K. Esbensen, M. G. Schlax, N. Thum, M. H. Freilich, F. J. Wentz, C. L. Gentemann, M. J. McPhaden and P. S. Schopf (2001). "Observations of Coupling between Surface Wind Stress and Sea Surface Temperature in the Eastern Tropical Pacific." Journal of Climate **14**(7): 1479-1498.

Cox, R. A., F. Culkin and J. P. Riley (1967). "The electrical conductivity/chlorinity relationship in natural sea water." Deep Sea Research and Oceanographic Abstracts **14**(2): 203-220.

D'Addezio, J. M., F. M. Bingham and G. A. Jacobs (2019). "Sea surface salinity subfootprint variability estimates from regional high-resolution model simulations." Remote Sensing of Environment **233**: 111365.

Da-Allada, C. Y., Y. du Penhoat, J. Jouanno, G. Alory and N. M. Hounkonnou (2014). "Modeled mixed-layer salinity balance in the Gulf of Guinea: seasonal and interannual variability." Ocean Dynamics **64**(12): 1783-1802.

Da-Allada, C. Y., J. Jouanno, F. Gaillard, N. Kolodziejczyk, C. Maes, N. Reul and B. Bourlès (2017). "Importance of the Equatorial Undercurrent on the sea surface salinity in the eastern equatorial Atlantic in boreal spring." Journal of Geophysical Research: Oceans **122**(1): 521-538.

Daganzo-Eusebio, E., R. Oliva, Y. H. Kerr, S. Nieto, P. Richaume and S. M. Mecklenburg (2013). "SMOS radiometer in the 1400–1427-MHz passive band: Impact of the RFI environment and approach to its mitigation and cancellation." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **51**(10): 4999-5007.

Dai, A., T. Qian, K. E. Trenberth and J. D. Milliman (2009). "Changes in Continental Freshwater Discharge from 1948 to 2004." Journal of Climate **22**(10): 2773-2792.

de Boyer Montégut, C., J. Mignot, A. Lazar and S. Cravatte (2007). "Control of salinity on the mixed layer depth in the world ocean: 1. General description." Journal of Geophysical Research **112**(C6).

de Rosnay, P., G. Balsamo, C. Albergel, J. Muñoz-Sabater and L. Isaksen (2012). "Initialisation of Land Surface Variables for Numerical Weather Prediction." Surveys in Geophysics **35**(3): 607-621.

Debreu, L., C. Vouland and E. Blayo (2008). "AGRIF: Adaptive grid refinement in Fortran." Computers & Geosciences **34**(1): 8-13.

Debye, P. (1929). "Polar molecules. By P. Debye, Ph. D., Pp. 172. New York: Chemical Catalog Co., Inc., 1929. $3.50." Journal of the Society of Chemical Industry **48**(43): 1036-1037.

Decharme, B., C. Delire, M. Minvielle, J. Colin, J. P. Vergnes, A. Alias, D. Saint-Martin, R. Séférian, S. Sénési and A. Voldoire (2019). "Recent Changes in the ISBA-CTRIP Land Surface System for Use in the CNRM-CM6 Climate Model and in Global Off-Line Hydrological Applications." Journal of Advances in Modeling Earth Systems **11**(5): 1207-1252.

Decharme, B., E. Martin and S. Faroux (2013). "Reconciling soil thermal and hydrological lower boundary conditions in land surface models." Journal of Geophysical Research: Atmospheres **118**(14): 7819-7834.

Dessier, A. and J. R. Donguy (1994). "The sea surface salinity in the tropical Atlantic between 10°S and 30°N—seasonal and interannual variations (1977–1989)." Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers **41**(1): 81-100.

Dickey, T. D. and R. R. Bidigare (2007). "Interdisciplinary oceanographic observations: the wave of the future." Scientia Marina **69**(S1): 23-42.

Dinnat, E. P. (2003). "Issues concerning the sea emissivity modeling at L band for retrieving surface salinity." Radio Science **38**(4).

Dinnat, E. P. and D. M. Le Vine (2008). "Impact of sun glint on salinity remote sensing: An example with the Aquarius radiometer." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **46**(10): 3137-3150.

Ditlevsen, P. and S. Ditlevsen (2023). "Warning of a forthcoming collapse of the Atlantic meridional overturning circulation." Nat Commun **14**(1): 4254.

Durack, P. J. and S. E. Wijffels (2010). "Fifty-year trends in global ocean salinities and their relationship to broad-scale warming." Journal of Climate **23**(16): 4342-4362.

Durand, F., C. G. Piecuch, M. Becker, F. Papa, S. V. Raju, J. U. Khan and R. M. Ponte (2019). "Impact of Continental Freshwater Runoff on Coastal Sea Level." Surveys in Geophysics **40**(6): 1437-1466.

Emery, W. J., A. Thomas, M. Collins, W. R. Crawford and D. Mackas (1986). "An objective method for computing advective surface velocities from sequential infrared satellite images." Journal of Geophysical Research: Oceans **91**(C11): 12865-12878.

Emery, W. J. and R. E. Thomson (2001). Statistical Methods and Error Handling. Data Analysis Methods in Physical Oceanography. R. E. T. William J. Emery, Elsevier Science**:** 193-304.

English, S., C. Prigent, B. Johnson, S. Yueh, E. Dinnat, J. Boutin, S. Newman, M. Anguelova, T. Meissner and M. Kazumori (2020). "Reference-quality emission and backscatter modeling for the ocean." Bulletin of the American Meteorological Society **101**(10): E1593-E1601.

Entekhabi, D., E. G. Njoku, P. E. O'Neill, K. H. Kellogg, W. T. Crow, W. N. Edelstein, J. K. Entin, S. D. Goodman, T. J. Jackson, J. Johnson, J. Kimball, J. R. Piepmeier, R. D. Koster, N. Martin, K. C. McDonald, M. Moghaddam, S. Moran, R. Reichle, J. C. Shi, M. W. Spencer, S. W. Thurman, L. Tsang and J. Van Zyl (2010). "The Soil Moisture Active Passive (SMAP) Mission." Proceedings of the IEEE **98**(5): 704-716.

Farrar, J. T. and T. S. Durland (2012). "Wavenumber–Frequency Spectra of Inertia–Gravity and Mixed Rossby–Gravity Waves in the Equatorial Pacific Ocean." Journal of Physical Oceanography **42**(11): 1859-1881.

Ferrari, R. and C. Wunsch (2009). "Ocean Circulation Kinetic Energy: Reservoirs, Sources, and Sinks." Annual Review of Fluid Mechanics **41**(1): 253-282.

Fieux, M. (2017). The planetary ocean.

Gaillard, F., D. Diverres, S. Jacquin, Y. Gouriou, J. Grelet, M. Le Menn, J. Tassel and G. Reverdin (2015). "Sea surface temperature and salinity from French research vessels, 2001–2013." Scientific Data **2**(1): 150054.

Gaube, P., D. J. McGillicuddy and A. J. Moulin (2019). "Mesoscale Eddies Modulate Mixed Layer Depth Globally." Geophysical Research Letters **46**(3): 1505-1512.

Gévaudan, M., F. Durand and J. Jouanno (2022). "Influence of the Amazon-Orinoco Discharge Interannual Variability on the Western Tropical Atlantic Salinity and Temperature." Journal of Geophysical Research: Oceans **127**(6).

Goff, J. A. (1946). "Low-pressure properties of water from-160 to 212F." Trans. of ASHVE: 95-122.

Gordon, A., C. Giulivi, J. Busecke and F. Bingham (2015). "Differences Among Subtropical Surface Salinity Patterns." Oceanography **28**(1): 32-39.

Guilyardi, E., G. Madec and L. Terray (2001). "The role of lateral ocean physics in the upper ocean thermal balance of a coupled ocean-atmosphere GCM." Climate Dynamics **17**(8): 589-599.

Guimbard, S., N. Reul, R. Sabia, S. Herlédan, Z. E. Khoury Hanna, J.-F. Piollé, F. Paul, T. Lee, J. J. Schanze and F. M. Bingham (2021). "The salinity pilot-mission exploitation platform (Pi-mep): A hub for validation and exploitation of satellite sea surface salinity data." Remote Sensing **13**(22): 4600.

Guimbard, S., N. Reul, R. Sabia, S. Herlédan, Z. E. Khoury Hanna, J.-F. Piollé, F. Paul, T. Lee, J. J. Schanze, F. M. Bingham, D. Le Vine, N. Vinogradova-Shiffer, S. Mecklenburg, K. Scipal and H. Laur (2021). "The Salinity Pilot-Mission Exploitation Platform (Pi-MEP): A Hub for

Validation and Exploitation of Satellite Sea Surface Salinity Data." Remote Sensing **13**(22): 4600.

Harrigan, S., E. Zsoter, L. Alfieri, C. Prudhomme, P. Salamon, F. Wetterhall, C. Barnard, H. Cloke and F. Pappenberger (2020). "GloFAS-ERA5 operational global river discharge reanalysis 1979–present." Earth System Science Data **12**(3): 2043-2060.

Hasson, A., J. T. Farrar, J. Boutin, F. Bingham and T. Lee (2019). "Intraseasonal Variability of Surface Salinity in the Eastern Tropical Pacific Associated With Mesoscale Eddies." Journal of Geophysical Research: Oceans **124**(4): 2861-2875.

Hasson, A., M. Puy, J. Boutin, E. Guilyardi and R. Morrow (2018). "Northward Pathway Across the Tropical North Pacific Ocean Revealed by Surface Salinity: How do El Niño Anomalies Reach Hawaii?" Journal of Geophysical Research: Oceans **123**(4): 2697-2715.

Hersbach, H., B. Bell, P. Berrisford, S. Hirahara, A. Horányi, J. Muñoz-Sabater, J. Nicolas, C. Peubey, R. Radu and D. Schepers (2020). "The ERA5 global reanalysis." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society **146**(730): 1999-2049.

Hewitt, H. T., M. Roberts, P. Mathiot, A. Biastoch, E. Blockley, E. P. Chassignet, B. Fox-Kemper, P. Hyder, D. P. Marshall, E. Popova, A.-M. Treguier, L. Zanna, A. Yool, Y. Yu, R. Beadling, M. Bell, T. Kuhlbrodt, T. Arsouze, A. Bellucci, F. Castruccio, B. Gan, D. Putrasahan, C. D. Roberts, L. Van Roekel and Q. Zhang (2020). "Resolving and Parameterising the Ocean Mesoscale in Earth System Models." Current Climate Change Reports **6**(4): 137-152.

Hickey, B. M., R. M. Kudela, J. D. Nash, K. W. Bruland, W. T. Peterson, P. MacCready, E. J. Lessard, D. A. Jay, N. S. Banas, A. M. Baptista, E. P. Dever, P. M. Kosro, L. K. Kilcher, A. R. Horner-Devine, E. D. Zaron, R. M. McCabe, J. O. Peterson, P. M. Orton, J. Pan and M. C. Lohan (2010). "River Influences on Shelf Ecosystems: Introduction and synthesis." Journal of Geophysical Research **115**.

Hill, C., J. Marshall, R. Tulloch and K. S. Smith (2011). "Scales, Growth Rates, and Spectral Fluxes of Baroclinic Instability in the Ocean." Journal of Physical Oceanography **41**(6): 1057-1076.

Hilt, M., F. Auclair, R. Benshila, L. Bordois, X. Capet, L. Debreu, F. Dumas, S. Jullien, F. Lemarié, P. Marchesiello, C. Nguyen and L. Roblou (2020). "Numerical modelling of hydraulic control, solitary waves and primary instabilities in the Strait of Gibraltar." Ocean Modelling **151**.

Hirpa, F. A., P. Salamon, H. E. Beck, V. Lorini, L. Alfieri, E. Zsoter and S. J. Dadson (2018). "Calibration of the Global Flood Awareness System (GloFAS) using daily streamflow data." J Hydrol (Amst) **566**: 595-606.

Holte, J., L. D. Talley, J. Gilson and D. Roemmich (2017). "An Argo mixed layer climatology and database." Geophysical Research Letters **44**(11): 5618-5626.

Hou, A. Y., R. K. Kakar, S. Neeck, A. A. Azarbarzin, C. D. Kummerow, M. Kojima, R. Oki, K. Nakamura and T. Iguchi (2014). "The Global Precipitation Measurement Mission." Bulletin of the American Meteorological Society **95**(5): 701-722.

Houndegnonto, O. J., N. Kolodziejczyk, C. Maes, B. Bourlès, C. Y. Da-Allada and N. Reul (2021). "Seasonal Variability of Freshwater Plumes in the Eastern Gulf of Guinea as Inferred From Satellite Measurements." Journal of Geophysical Research: Oceans **126**(5): e2020JC017041.

Ide, K., P. Courtier, M. Ghil and A. C. Lorenc (1997). "Unified notation for data assimilation: Operational, sequential and variational (gtspecial issueltdata assimilation in meteology and

oceanography: Theory and practice)." Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II **75**(1B): 181-189.

J. Boutin, J.-L. V., L. Olivier, G. Reverdin, X. Perrot, C. Thouvenin-Masson (2022). "SMOS SMAP High Resolution SSS maps in regions of high variability, generated by CATDS CEC." SEANOE.

JCGM (2008). Evaluation of Measurement Data – Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement, JCGM 100:2008.

Joyce, R. J., J. E. Janowiak, P. A. Arkin and P. Xie (2004). "CMORPH: A method that produces global precipitation estimates from passive microwave and infrared data at high spatial and temporal resolution." Journal of hydrometeorology **5**(3): 487-503.

Kerr, Y., P. Waldteufel, J. Wigneron, S. Delwart, F. Cabot, J. Boutin, M. Escorihuela, J. Font, N. Reul, C. Gruhier, S. E. Juglea, M. R. Drinkwater, A. Hahne, M. Martín-Neira and S. Mecklenburg (2010). "The SMOS Mission: New Tool for Monitoring Key Elements ofthe Global Water Cycle." Proceedings of the IEEE **98**(5): 666-687.

Kerr, Y. H., P. Waldteufel, J. Wigneron, J. Martinuzzi, J. Font and M. Berger (2001). "Soil moisture retrieval from space: the Soil Moisture and Ocean Salinity (SMOS) mission." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **39**(8): 1729-1735.

Kilic, L., C. Prigent, F. Aires, J. Boutin, G. Heygster, R. T. Tonboe, H. Roquet, C. Jimenez and C. Donlon (2018). "Expected performances of the Copernicus Imaging Microwave Radiometer (CIMR) for an all-weather and high spatial resolution estimation of ocean and sea ice parameters." Journal of Geophysical Research: Oceans **123**(10): 7564-7580.

Klein, L. and C. Swift (1977). "An improved model for the dielectric constant of sea water at microwave frequencies." IEEE transactions on antennas and propagation **25**(1): 104-111.

Klein, P. and G. Lapeyre (2006). "Dynamics of the Upper Oceanic Layers in Terms of Surface Quasigeostrophy Theory." Journal of Physical Oceanography **36**(2): 165-176.

Kolodziejczyk, N., O. Hernandez, J. Boutin and G. Reverdin (2015). "SMOS salinity in the subtropical North Atlantic salinity maximum: 2. Two-dimensional horizontal thermohaline variability." Journal of Geophysical Research: Oceans **120**(2): 972-987.

Kolodziejczyk, N., A. Prigent-Mazella and F. Gaillard (2017). ISAS-15 temperature and salinity gridded fields.

Kolodziejczyk, N., G. Reverdin, J. Boutin and O. Hernandez (2015). "Observation of the surface horizontal thermohaline variability at mesoscale to submesoscale in the north-eastern subtropical Atlantic Ocean." Journal of Geophysical Research: Oceans **120**(4): 2588-2600.

Lagerloef, G., F. R. Colomb, D. Le Vine, F. Wentz, S. Yueh, C. Ruf, J. Lilly, J. Gunn, Y. Chao and A. DECHARON (2008). "The Aquarius/SAC-D mission: Designed to meet the salinity remote-sensing challenge." Oceanography **21**(1): 68-81.

Lagerloef, G., A. deCharon and E. Lindstrom (2013). "Ocean Salinity and the Aquarius/SAC-D Mission: A New Frontier in Ocean Remote Sensing." Marine Technology Society Journal **47**(5): 26-30.

Lavers, D. A., A. Simmons, F. Vamborg and M. J. Rodwell (2022). "An evaluation of ERA5 precipitation for climate monitoring." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society **148**(748): 3152-3165.

Lee, T., G. Lagerloef, H.-Y. Kao, M. J. McPhaden, J. Willis and M. M. Gierach (2014). "The influence of salinity on tropical Atlantic instability waves." Journal of Geophysical Research: Oceans **119**(12): 8375-8394.

Lellouche, J.-M., E. Greiner, O. Le Galloudec, G. Garric, C. Regnier, M. Drevillon, M. Benkiran, C.-E. Testut, R. Bourdalle-Badie, F. Gasparin, O. Hernandez, B. Levier, Y. Drillet, E. Remy and P.-Y. Le Traon (2018). "Recent updates to the Copernicus Marine Service global ocean monitoring and forecasting real-time 1⁄12° high-resolution system." Ocean Science **14**(5): 1093-1126.

Lellouche, J.-M., E. Greiner, B.-B. Romain, G. Gilles, M. Angélique, D. Marie, B. Clément, H. Mathieu, L. G. Olivier, R. Charly, C. Tony, T. Charles-Emmanuel, G. Florent, R. Giovanni, B. Mounir, D. Yann and L. T. Pierre-Yves (2021). "The Copernicus Global 1/12° Oceanic and Sea Ice GLORYS12 Reanalysis." Frontiers in Earth Science **9**.

Lique, C., M. Thomas, H. Johnson and Y. Plancherel (2017). Potential for deep convection in the Arctic Basin under a warming climate and contribution to the AMOC. EGU General Assembly Conference Abstracts.

Liu, W., S. P. Xie, Z. Liu and J. Zhu (2017). "Overlooked possibility of a collapsed Atlantic Meridional Overturning Circulation in warming climate." Sci Adv **3**(1): e1601666.

Lukas, R. and E. Lindstrom (1991). "The mixed layer of the western equatorial Pacific Ocean." Journal of Geophysical Research **96**(S01).

Madec, G., R. Bourdallé-Badie, P.-A. Bouttier, C. Bricaud, D. Bruciaferri, D. Calvert, J. Chanut, E. Clementi, A. Coward and D. Delrosso (2017). "NEMO ocean engine."

Manabe, S. and R. J. Stouffer (1995). "Simulation of abrupt climate change induced by freshwater input to the North Atlantic Ocean." Nature **378**(6553): 165-167.

Marshall, J. and F. Schott (1999). "Open-ocean convection: Observations, theory, and models." Reviews of Geophysics **37**(1): 1-64.

Masson, S., J. J. Luo, G. Madec, J. Vialard, F. Durand, S. Gualdi, E. Guilyardi, S. Behera, P. Delecluse, A. Navarra and T. Yamagata (2005). "Impact of barrier layer on winter-spring variability of the southeastern Arabian Sea." Geophysical Research Letters **32**(7): n/a-n/a.

Masson-Delmotte, V., P. Zhai, A. Pirani, S. L. Connors, C. Péan, S. Berger, N. Caud, Y. Chen, L. Goldfarb and M. Gomis (2021). "Climate change 2021: the physical science basis." Contribution of working group I to the sixth assessment report of the intergovernmental panel on climate change **2**.

McDougall, T. J. and O. A. Krzysik (2015). "Spiciness." Journal of Marine Research **73**(5): 141-152.

Meissner, T., F. Wentz, A. Manaster and R. Lindsley (2019). NASA/RSS SMAP Salinity: Version4.0 Validated Release, RSS Technical

Meissner, T. and F. J. Wentz (2012). "The Emissivity of the Ocean Surface Between 6 and 90 GHz Over a Large Range of Wind Speeds and Earth Incidence Angles." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **50**(8): 3004-3026.

Melnichenko, O., P. Hacker and V. Müller (2021). "Observations of Mesoscale Eddies in Satellite SSS and Inferred Eddy Salt Transport." Remote Sensing **13**(2).

Merchant, C. J., F. Paul, T. Popp, M. Ablain, S. Bontemps, P. Defourny, R. Hollmann, T. Lavergne, A. Laeng, G. de Leeuw, J. Mittaz, C. Poulsen, A. C. Povey, M. Reuter, S.

Sathyendranath, S. Sandven, V. F. Sofieva and W. Wagner (2017). "Uncertainty information in climate data records from Earth observation." Earth Syst. Sci. Data **9**(2): 511-527.

Mignot, J., C. de Boyer Montégut, A. Lazar and S. Cravatte (2007). "Control of salinity on the mixed layer depth in the world ocean: 2. Tropical areas." Journal of Geophysical Research **112**(C10).

Millero, F. J., R. Feistel, D. G. Wright and T. J. McDougall (2008). "The composition of Standard Seawater and the definition of the Reference-Composition Salinity Scale." Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers **55**(1): 50-72.

Mohammed, P. N., M. Aksoy, J. R. Piepmeier, J. T. Johnson and A. Bringer (2016). "SMAP L-band microwave radiometer: RFI mitigation prelaunch analysis and first year on-orbit observations." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **54**(10): 6035-6047.

Ndoye, S., X. Capet, P. Estrade, E. Machu, L. Kounta, B. Sow, M. Diakhaté and A. T. Gaye (2018). "A numerical modeling study of the Southern Senegal upwelling shelf: Circulation and upwelling source waters." African Journal of Environmental Science and Technology **12**(12): 487-500.

Oki, T. and Y. C. Sud (1998). "Design of Total Runoff Integrating Pathways (TRIP)—A Global River Channel Network." Earth Interactions **2**(1): 1-37.

Pickard, G. L., W. J. Emery (1964). "Descriptive physical oceanography."

Piecuch, C. G., K. Bittermann, A. C. Kemp, R. M. Ponte, C. M. Little, S. E. Engelhart and S. J. Lentz (2018). "River-discharge effects on United States Atlantic and Gulf coast sea-level changes." Proc Natl Acad Sci U S A **115**(30): 7729-7734.

Piecuch, C. G. and R. Wadehra (2020). "Dynamic Sea Level Variability Due to Seasonal River Discharge: A Preliminary Global Ocean Model Study." Geophysical Research Letters **47**(4).

Piepmeier, J. R., P. Focardi, K. A. Horgan, J. Knuble, N. Ehsan, J. Lucey, C. Brambora, P. R. Brown, P. J. Hoffman and R. T. French (2017). "SMAP L-band microwave radiometer: Instrument design and first year on orbit." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **55**(4): 1954-1966.

Piepmeier, J. R., J. T. Johnson, P. N. Mohammed, D. Bradley, C. Ruf, M. Aksoy, R. Garcia, D. Hudson, L. Miles and M. Wong (2014). "Radio-Frequency Interference Mitigation for the Soil Moisture Active Passive Microwave Radiometer." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **52**(1): 761-775.

Rahmstorf, S. (1995). "Bifurcations of the Atlantic thermohaline circulation in response to changes in the hydrological cycle." Nature **378**(6553): 145-149.

Reul, N. and B. Chapron (2003). "A model of sea-foam thickness distribution for passive microwave remote sensing applications." Journal of Geophysical Research: Oceans **108**(C10).

Reul, N., B. Chapron, S. A. Grodsky, S. Guimbard, V. Kudryavtsev, G. R. Foltz and K. Balaguru (2021). "Satellite Observations of the Sea Surface Salinity Response to Tropical Cyclones." Geophysical Research Letters **48**(1): e2020GL091478.

Reul, N., S. A. Grodsky, M. Arias, J. Boutin, R. Catany, B. Chapron, F. d'Amico, E. Dinnat, C. Donlon and A. Fore (2020). "Sea surface salinity estimates from spaceborne L-band radiometers: An overview of the first decade of observation (2010–2019)." Remote Sensing of Environment **242**: 111769.

Reul, N., S. A. Grodsky, M. Arias, J. Boutin, R. Catany, B. Chapron, F. D'Amico, E. Dinnat, C. Donlon, A. Fore, S. Fournier, S. Guimbard, A. Hasson, N. Kolodziejczyk, G. Lagerloef, T.

Lee, D. M. Le Vine, E. Lindstrom, C. Maes, S. Mecklenburg, T. Meissner, E. Olmedo, R. Sabia, J. Tenerelli, C. Thouvenin-Masson, A. Turiel, J. L. Vergely, N. Vinogradova, F. Wentz and S. Yueh (2020). "Sea surface salinity estimates from spaceborne L-band radiometers: An overview of the first decade of observation (2010–2019)." Remote Sensing of Environment **242**: 111769.

Reul, N., Y. Quilfen, B. Chapron, S. Fournier, V. Kudryavtsev and R. Sabia (2014). "Multisensor observations of the Amazon-Orinoco river plume interactions with hurricanes." Journal of Geophysical Research: Oceans **119**(12): 8271-8295.

Reul, N., J. Tenerelli, J. Boutin, B. Chapron, F. Paul, E. Brion, F. Gaillard and O. Archer (2012). "Overview of the first SMOS sea surface salinity products. Part I: Quality assessment for the second half of 2010." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **50**(5): 1636-1647.

Reul, N., J. Tenerelli, B. Chapron and P. Waldteufel (2007). "Modeling sun glitter at L-band for sea surface salinity remote sensing with SMOS." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **45**(7): 2073-2087.

Reverdin, G., E. Kestenare, C. Frankignoul and T. Delcroix (2007). "Surface salinity in the Atlantic Ocean (30°S–50°N)." Progress in Oceanography **73**(3-4): 311-340.

Roemmich, D., O. Boebel, Y. Desaubies, H. Freeland, B. King, P.-Y. LeTraon, R. Molinari, B. Owens, S. Riser and U. Send (1999). "Argo: The global array of profiling floats." CLIVAR Exchanges **13**(4 (3)): 4-5.

Ruault, V., J. Jouanno, F. Durand, J. Chanut and R. Benshila (2020). "Role of the tide on the structure of the Amazon plume: A numerical modeling approach." Journal of Geophysical Research: Oceans **125**(2): e2019JC015495.

Saha, S., S. Moorthi, H.-L. Pan, X. Wu, J. Wang, S. Nadiga, P. Tripp, R. Kistler, J. Woollen and D. Behringer (2010). "NCEP climate forecast system reanalysis (CFSR) 6-hourly products, January 1979 to December 2010."

Sallee, J. B., V. Pellichero, C. Akhoudas, E. Pauthenet, L. Vignes, S. Schmidtko, A. N. Garabato, P. Sutherland and M. Kuusela (2021). "Summertime increases in upper-ocean stratification and mixed-layer depth." Nature **591**(7851): 592-598.

Scipal, K., A. Beljaars, G. Balsamo, P. Viterbo, B. van den Hurk, M. Hirschi and A. K. Betts (2009). "A Revised Hydrology for the ECMWF Model: Verification from Field Site to Terrestrial Water Storage and Impact in the Integrated Forecast System." Journal of Hydrometeorology **10**(3): 623-643.

Servain, J., A. J. Busalacchi, M. J. McPhaden, A. D. Moura, G. Reverdin, M. Vianna and S. E. Zebiak (1998). "A Pilot Research Moored Array in the Tropical Atlantic (PIRATA)." Bulletin of the American Meteorological Society **79**(10): 2019-2031.

Shchepetkin, A. F. and J. C. McWilliams (2005). "The regional oceanic modeling system (ROMS): a split-explicit, free-surface, topography-following-coordinate oceanic model." Ocean Modelling **9**(4): 347-404.

Shchepetkin, A. F. and J. C. McWilliams (2009). "Correction and commentary for “Ocean forecasting in terrain-following coordinates: Formulation and skill assessment of the regional ocean modeling system” by Haidvogel et al., J. Comp. Phys. 227, pp. 3595–3624." Journal of Computational Physics **228**(24): 8985-9000.

Somaraju, R. and J. Trumpf (2006). "Frequency, temperature and salinity variation of the permittivity of seawater." IEEE transactions on Antennas and Propagation **54**(11): 3441-3448.

Spall, M. A. and R. S. Pickart (2001). "Where Does Dense Water Sink? A Subpolar Gyre Example*." Journal of Physical Oceanography **31**(3): 810-826.

Speer, K. and G. Forget (2013). Global distribution and formation of mode waters. International geophysics, Elsevier. **103:** 211-226.

Supply, A. (2020). Étude des dessalures à la surface d'un océan stratifié à partir d'observations satellitaires et de mesures in-situ, Sorbonne université.

Supply, A., J. Boutin, G. Reverdin, J.-L. Vergely and H. Bellenger (2020). Variability of Satellite Sea Surface Salinity Under Rainfall. Satellite Precipitation Measurement: Volume 2. V. Levizzani, C. Kidd, D. B. Kirschbaum et al. Cham, Springer International Publishing**:** 1155-1176.

Supply, A., J. Boutin, J.-L. Vergely, N. Martin, A. Hasson, G. Reverdin, C. Mallet and N. Viltard (2018). "Precipitation Estimates from SMOS Sea-Surface Salinity." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society **144**(S1): 103-119.

Suzuki, T., D. Yamazaki, H. Tsujino, Y. Komuro, H. Nakano and S. Urakawa (2018). "A dataset of continental river discharge based on JRA-55 for use in a global ocean circulation model." Journal of oceanography **74**: 421-429.

Tailleux, R. (2021). "Spiciness theory revisited, with new views on neutral density, orthogonality, and passiveness." Ocean Science **17**(1): 203-219.

Talley, L. (2013). "Closure of the Global Overturning Circulation Through the Indian, Pacific, and Southern Oceans: Schematics and Transports." Oceanography **26**(1): 80-97.

Terray, L., L. Corre, S. Cravatte, T. Delcroix, G. Reverdin and A. Ribes (2012). "Near-surface salinity as nature's rain gauge to detect human influence on the tropical water cycle." Journal of Climate **25**(3): 958-977.

Thomson, R. E. and I. V. Fine (2003). "Estimating Mixed Layer Depth from Oceanic Profile Data." Journal of Atmospheric and Oceanic Technology **20**(2): 319-329.

Thouvenin-Masson, C., J. Boutin, J.-L. Vergely, G. Reverdin, A. C. Martin, S. Guimbard, N. Reul, R. Sabia, R. Catany and O. Hembise Fanton-d'Andon (2022). "Satellite and in situ sampling mismatches: Consequences for the estimation of satellite sea surface salinity uncertainties." Remote Sensing **14**(8): 1878.

Uchida, T., J. Le Sommer, C. Stern, R. P. Abernathey, C. Holdgraf, A. Albert, L. Brodeau, E. P. Chassignet, X. Xu, J. Gula, G. Roullet, N. Koldunov, S. Danilov, Q. Wang, D. Menemenlis, C. Bricaud, B. K. Arbic, J. F. Shriver, F. Qiao, B. Xiao, A. Biastoch, R. Schubert, B. Fox-Kemper, W. K. Dewar and A. Wallcraft (2022). "Cloud-based framework for inter-comparing submesoscale-permitting realistic ocean models." Geoscientific Model Development **15**(14): 5829-5856.

Vergely, J.-L., P. Waldteufel, J. Boutin, X. Yin and P. Spurgeon (2014). TEC obtained from 3rd Stokes parameter for improved quality of SMOS salinity retrieval. EGU General Assembly Conference Abstracts.

Vialard, J. and P. Delecluse (1998). "An OGCM Study for the TOGA Decade. Part I: Role of Salinity in the Physics of the Western Pacific Fresh Pool." Journal of Physical Oceanography **28**(6): 1071-1088.

Vinogradova, N., T. Lee, J. Boutin, K. Drushka, S. Fournier, R. Sabia, D. Stammer, E. Bayler, N. Reul, A. Gordon, O. Melnichenko, L. Li, E. Hackert, M. Martin, N. Kolodziejczyk, A.

Hasson, S. Brown, S. Misra and E. Lindstrom (2019). "Satellite Salinity Observing System: Recent Discoveries and the Way Forward." Frontiers in Marine Science **6**(243).

Vinogradova, N. T. and R. M. Ponte (2017). "In Search of Fingerprints of the Recent Intensification of the Ocean Water Cycle." Journal of Climate **30**(14): 5513-5528.

Waldteufel, P., J. Vergely and C. Cot (2004). "A modified cardioid model for Processing multiangular radiometric observations." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **42**(5): 1059-1063.

Wohl, E. and K. B. Lininger (2022). "Hydrology and discharge." Large Rivers: Geomorphology and Management, Second Edition: 42-75.

Yin, X., J. Boutin, G. Reverdin, T. Lee, S. Arnault and N. Martin (2014). "SMOS Sea Surface Salinity signals of tropical instability waves." Journal of Geophysical Research: Oceans **119**(11): 7811-7826.

Yu, L. (2015). "Sea-surface salinity fronts and associated salinity-minimum zones in the tropical ocean." Journal of Geophysical Research: Oceans **120**(6): 4205-4225.

Yu, L., S. A. Josey, F. M. Bingham and T. Lee (2020). "Intensification of the global water cycle and evidence from ocean salinity: a synthesis review." Annals of the New York Academy of Sciences **1472**(1): 76-94.

Zine, S., J. Boutin, J. Font, N. Reul, P. Waldteufel, C. Gabarro, J. Tenerelli, F. Petitcolin, J.-L. Vergely, M. Talone and S. Delwart (2008). "Overview of the SMOS Sea Surface Salinity Prototype Processor." IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing **46**(3): 621-645.