



TÉLÉDÉTECTION OPTIQUE DES EAUX CÔTIÈRES DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ
dans le cadre du programme de maîtrise en océanographie
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences

PAR

©RAPHAËL MABIT

Novembre 2021

Composition du jury :

Pierre Larouche, président du jury, UQAR ISMER

Simon Bélanger, directeur de recherche, UQAR

Daniel Bourgault, codirecteur de recherche, UQAR ISMER

Cédric G. Fichot, examinateur externe, Boston University

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À RIMOUSKI

Service de la bibliothèque

Avertissement

La diffusion de ce mémoire ou de cette thèse se fait dans le respect des droits de son auteur, qui a signé le formulaire « *Autorisation de reproduire et de diffuser un rapport, un mémoire ou une thèse* ». En signant ce formulaire, l'auteur concède à l'Université du Québec à Rimouski une licence non exclusive d'utilisation et de publication de la totalité ou d'une partie importante de son travail de recherche pour des fins pédagogiques et non commerciales. Plus précisément, l'auteur autorise l'Université du Québec à Rimouski à reproduire, diffuser, prêter, distribuer ou vendre des copies de son travail de recherche à des fins non commerciales sur quelque support que ce soit, y compris l'Internet. Cette licence et cette autorisation n'entraînent pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits moraux ni à ses droits de propriété intellectuelle. Sauf entente contraire, l'auteur conserve la liberté de diffuser et de commercialiser ou non ce travail dont il possède un exemplaire.

“Too little confidence, and you’re unable to act. Too much confidence, and you’re unable to hear.”

John Maeda

REMERCIEMENTS

Ce projet de recherche m'a été offert comme une possibilité de plonger dans l'océanographie. C'était aussi l'occasion de développer des compétences dans les techniques de la télédétection aquatique depuis l'espace. Ces deux domaines sont pour moi une découverte récente qui répond à des aspirations anciennes. Explorer l'Océan depuis la position de l'observateur distant met en lumière les formes d'un environnement fascinant. Il reste beaucoup à faire pour explorer le fond des côtes du Québec, du Canada et d'ailleurs. Si les techniques de télédétection peuvent nous y aider, elles ne remplaceront jamais la présence humaine sur le terrain. L'observateur qui se rapproche de son objet d'étude, imagine et voit différemment, il se retrouve finalement changé par lui. J'espère avoir la chance d'être changé par l'Océan tout au long de ma vie.

Je tiens à remercier Simon Bélanger d'avoir donné un terrain de jeu à ma curiosité et ma motivation. Il faut souligner que c'était audacieux de recruter un étudiant littéraire, formé à la géographie humaine et à l'anthropologie, pour un projet de développement d'algorithmes de télédétection optique côtière. Je n'aurais jamais pensé pouvoir travailler en recherche dans ce domaine avec la liberté et l'autonomie qui m'est offerte aujourd'hui. Deux choses fondamentales dans le plaisir que je prends au travail. Merci à Rakesh et à Soham d'avoir pris le temps de m'expliquer la physique de la télédétection optique, vous m'avez donné les outils pour avancer. Merci à Carlos pour ses conseils d'ordre scientifique autant que musicaux, ça ajoute un supplément d'âme. Merci aussi à toutes les personnes qui de près ou de loin ont permis d'acquérir les données utilisées dans ce travail. Notamment aux Cree de la baie James et à Glen de Sept-Îles, que leur pêche soit aussi fructueuse en poisson que la nôtre l'a été en données ! Enfin, merci aux organismes, projets de recherche et réseaux scientifiques d'avoir permis la réalisation et la diffusion de ce travail : Québec-Océan, COast-JB, CHONe, WISE-Man, INREST, NetCOLOR. Ce projet a pu être réalisé grâce au financement obtenu de la société Niskamoon (projet CoastJB), du CRSNG industriel et de l'INREST (projet CHONe2),

de l'Agence Spatiale Canadienne et du Ministère des Pêches et Océans (projet WISE-Man) et du CRSNG-découverte (PMZA-Riki).

RÉSUMÉ

Les apports fluviaux de matière particulaire en suspension (MPS) et de matière organique dissoute colorée (MODC) sont les principaux constituants optiquement actifs rencontrés dans les eaux côtières. Les capteurs satellitaires optiques à moyenne et haute résolution, tels que l'*Operational Land Imager* (OLI) monté sur Landsat-8 et le *MultiSpectral Instrument* (MSI) sur Sentinel-2, offrent maintenant une vue synoptique des systèmes côtiers sur une base hebdomadaire, permettant l'étude de la dynamique côtière (panaches de rivières, remise en suspension des sédiments, efflorescence d'algues nuisibles). L'estimation précise de la MODC et des MPS depuis l'espace nécessite l'adaptation régionale des algorithmes bio-optiques. Ce travail est basé sur un jeu de données *in situ* des mesures de MODC, MPS et des propriétés optiques (apparentes et intrinsèques) provenant de différentes campagnes de terrain conduites entre 2015 et 2019 dans les eaux côtières de l'Estuaire et du Golfe du Saint-Laurent (EGSL) et de l'est de la Baie James (BJ). L'assemblage des données acquises selon différentes configurations avec différents instruments a mené à la création d'une structure générique de stockage et de traitement des données. Bâtie sur cette structure, une nouvelle librairie R dédiée à l'automatisation de la gestion des données intègre des outils d'analyse de la qualité et d'exploration des données, en tirant parti des technologies web interactives. Après une analyse exploratoire de ce jeu de données, des algorithmes régionaux ont été développés spécifiquement pour les capteurs OLI et MSI. Les résultats montrent que l'absorption de la MODC à 440 nm peut être estimée par l'utilisation d'un seul algorithme basé sur un ratio de la bande rouge sur la bande verte, tant pour l'EGSL que pour la BJ. L'estimation de la concentration des MPS requiert des algorithmes régionaux pour l'EGSL et la BJ, ceci à cause de différences dans la nature des particules, telle qu'exprimée par leur propriété optique intrinsèque spécifique à la masse. Finalement, l'application de ces algorithmes aux images satellitaires correspondant aux points d'acquisition *in situ*, a montré que l'algorithme de correction atmosphérique C2RCC donne les meilleurs résultats pour retrouver la R_{rs} comparés aux autres algorithmes de corrections atmosphérique testés.

Mots clés : télédétection, algorithmes, MPS, MODC, eaux optiquement complexes, eaux côtières, corrections atmosphériques

ABSTRACT

Fluvial inputs of suspended particulate matter (SPM) and coloured dissolved organic matter (CDOM) are the primary optical constituents found in most coastal waters. Moderate and high-resolution satellite optical sensors, such as *Operational Land Imager* (OLI) on Landsat-8 and *MultiSpectral Instrument* (MSI) on Sentinel-2, now offer a synoptic view of coastal systems at a weekly temporal resolution allowing the study of coastal dynamics (river plumes, sediment resuspension events, harmful algal bloom). Accurate estimations of CDOM and SPM from space require regionally tuned bio-optical algorithms. This work is based on an extensive *in situ* data set of CDOM, SPM, and optical properties (both apparent and inherent) from various field campaigns carried in coastal waters of the Estuary and Gulf of St. Lawrence (EGSL) and eastern James Bay (JB). The assembly of the data acquired with different configurations and instruments led to the creation of a generic structure for storage and processing. Building on that structure, a new R package dedicated to automation of data management, integrate tools for quality analysis and data exploration taking advantage of interactive web technologies. After an exploratory data analysis, we developed regional algorithms for OLI and MSI sensors. We found that CDOM at 440 nm can be retrieved using a single band ratio of green-to-red for both EGSL and JB. At the same time, SPM algorithms required regional adjustments due to differences in the distinct nature of the particles, as expressed by their mass-specific inherent optical properties. Finally, the application of those algorithms to satellite images corresponding with *in situ* acquisition points, showed that the atmospheric correction algorithm C2RCC gives the best results to retrieve the R_{rs} compared to others algorithms tested.

Keywords : remote sensing, algorithms, SPM, CDOM, optically complex waters, coastal waters, atmospheric correction.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	vi
RÉSUMÉ	viii
ABSTRACT	ix
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiii
INTRODUCTION GÉNÉRALE	1
Motivation	1
Cadre scientifique	1
Objectifs	3
Structure du mémoire	4
Cadre théorique	5
Zones d'études	7
CHAPITRE 1	
LA GESTION DES DONNÉES, DE L'ACQUISITION À L'ANALYSE	16
1.1 Une structure générique	17
1.2 Du concept à la réalité	18
1.3 Contrôle de la qualité des données	24
1.4 Favoriser l'exploration des données	27
CHAPITRE 2	
ALGORITHMES DE TÉLÉDÉTECTION POUR ESTIMER LA MPS ET LA MODC DANS LES EAUX CÔTIÈRES DU QUÉBEC	29
2.1 Remote sensing algorithms to retrieve SPM and CDOM in Québec coastal waters	31
2.2 Introduction	31
2.3 Materials and methods	36
2.3.1 Study area and sampling	36

2.3.2	Derivation of R_{rs}	38
2.3.3	Particulate backscattering	39
2.3.4	Discrete water sample measurements	40
2.3.5	Algorithm development and performance metrics	41
2.3.6	Matchup exercise and atmospheric correction comparison	41
2.4	Results	43
2.4.1	Exploratory Data Analysis	43
2.4.2	Empirical algorithms development	49
2.4.3	Validation with matching satellite imagery	55
2.5	Discussion	66
2.5.1	Effects of interrelations between CDOM and SPM on R_{rs}	66
2.5.2	Linking R_{rs} ratio and $a_g(440)$	67
2.5.3	Linking C_{SPM} and R_{rs}	68
2.5.4	Positive correlation of CDOM and R_{rs} at 665 and 740 nm	71
2.5.5	Matchup analysis and atmospheric correction comparison	72
2.6	Conclusion	73
2.7	Annex	75
	CONCLUSION GÉNÉRALE	76
	RÉFÉRENCES	83

LISTE DES TABLEAUX

1	Symbols and acronyms definitions and units	34
2	Number of concomitant measurement of R_{rs} with C_{SPM} and IOPs (a_g , b_b) in the EGSL and James Bay	37
3	Regional mean mass-specific particulate absorption and backscattering (in $m^2 g^{-1}$) at 532 nm of C_{SPM}	49
4	Algorithms to retrieve $a_g(440)$, $a_g(295)$ and $a_g(275)$, with associated performance metrics.	51
5	Regional algorithms for C_{SPM} with their associated performance metrics.	54
6	Performance metrics of atmospheric correction algorithms for R_{rs} retrieval by wavelength	58
7	Performance metrics of atmospheric correction algorithms for CDOM retrieval	62
8	Performance metrics of atmospheric correction algorithms for C_{SPM} retrieval .	64
9	Sensor specific coefficients for $a_g(440)$ and C_{SPM} algorithms	75

LISTE DES FIGURES

1	Composé RGB de la baie de Sept-Îles vue le 17/09/2019 par le capteur OLI à bord du satellite Landsat 8. Les croix oranges correspondent aux positions des échantillons de la base de données.	9
2	La Péninsule Manicouagan vue le 13/06/2021 par le capteur MSI à bord du satellite Sentinel 2. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.	11
3	L'estuaire du Saint-Laurent vu le 13/06/2021 par le capteur MSI à bord du satellite Sentinel 2. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.	13
4	La baie James vue le 11/07/2021 par le capteur OLCI à bord du satellite Sentinel 3. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.	15
5	Schéma de la structure générique de stockage et de traitement des données.. .	18
6	Analyse de la relation entre le CDOM et le ratio de bande $R_{rs}(560)/R_{rs}(665)$, (A) première analyse, (B) après réanalyse de la station MAN-F05 (point encerclé en rouge)	21
7	Spectre de R_{rs} dérivé du C-OPS à la station MAN-F5. Les lignes continues et pointillées correspondent à l'extrapolation de $L_u(0^+)$ avec une méthode non-linéaire (LOESS) et linéaire, respectivement.	22
8	Spectre d'absorption utilisé pour la correction de l'ombre du C-OPS à la station MAN-F05. Les lignes verte, rouge et bleu correspondent respectivement à l'absorption due au CDOM, aux MPS et à l'eau. Les points correspondent à l'absorption totale.	23
9	Tableau interactif pour le contrôle qualité des données de SPM pour le projet CHONe. (A) Table des valeurs par réplica, (B) table des statistiques par échantillon, (C) profils CTD, (D) graphiques des relations CSPM avec les variables pertinentes disponibles au moment de la production du tableau, (E) en tête de sélection des graphiques, (F) accès au code source du panneau.	26

10	Tableau interactif pour l'exploration de la base de données globale. (A) Panneau des filtres pour réduire la quantité de données affichées, (B) Carte de localisation des stations d'échantillonnage, (C) table des métadonnées associées à chaque station, (D) graphique des données optiques, (E) en tête de sélection du graphique (R_{rs} ou IOPs), (F) accès au code source du tableau.	28
11	Localization map of the data sets, colours correspond to the different areas in which the data were acquired.	35
12	Kernel density function showing the distribution of spectral reflectance. Continuous, dashed, dot and dot-dashed lines represent R_{rs} at 440, 560, 665, 740 nanometers, respectively.	44
13	Histograms showing the distribution of C_{SPM} and $a_g(400)$ in the EGSL and JB	44
14	Relation between R_{rs} at 440, 560, 665, 740 nanometer and (A) C_{SPM} , (B) $b_{bp}(532)$, (C) $a_g(440)$. Plots (A) and (B) colours correspond to $a_g(440)$ to assess covariance patterns. Similarly, plots (C) colours correspond to C_{SPM} in square root space.	46
15	Relation between $b_b(532)$ and $a_g(532)$, the colour corresponds to C_{SPM} in square root space	47
16	(A) Mass specific particulate backscattering at 532 nm versus C_{SPM} , (B) Mass specific absorption at 443 nm versus C_{SPM} . Color corresponds to PIM fraction of total C_{SPM} , in percent. Black points corresponds to absence of PIM data.	48
17	Non-linear algorithms for $a_g(440)$ on log-log space by (A) band ratio $R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$, (B) band ratio $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$, (C) band ratio $R_{rs}(740)/R_{rs}(440)$. Continuous line corresponds to fitted values. Circles and triangles correspond to data acquired in the EGSL and in JB respectively. Station V11-11 in JB is flagged as optically shallow, the Secchi disk touch the bottom at 1.30 m.	50
18	Regional algorithms for C_{SPM} (A) from $R_{rs}(665)$ (B) from $R_{rs}(740)$, and (C) from $R_{rs}(710)/R_{rs}(665)$ ratio. Dashed line correspond to C_{SPM} values fitted with Nechad et al. (2010) algorithm.	53
19	C_{SPM} vs $R_{rs}(665)$ algorithm residuals as a function of $a_g(440)$. Yellow dot represents data from the EGSL and blue triangle data from JB. Yellow and blue lines represents the fitted relationships for the EGSL and JB respectively.	54
20	R_{rs} measured <i>in situ</i> and remotely in the EGSL (yellow) and in JB (blue) by MSI (circle) and OLI (triangle) in the blue (443 nm), green (560, 561 nm, respectively), red (665, 655 nm, respectively), NIR (704, 740 nm, MSI only) bands. The solid black line represents the 1:1 relation	57

21	$a_g(440)$ measured <i>in situ</i> vs estimated remotely with the red/blue algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.	61
22	$a_g(440)$ measured <i>in situ</i> vs estimated remotely with the red/green algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.	63
23	C_{SPM} measured <i>in situ</i> vs estimated remotely with the red band algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.	65
24	Composé coloré RGB PlanetScope de la Baie de Sept-Îles acquise le 03 Juin 2018 à 14H32 UTC.	79
25	Résultat de l'algorithme de flux optique dense de Farneback (librairie python OpenCV), les couleurs et l'intensité correspondes respectivement à la vitesse et la direction, mais en absence de légende ne sont pas interprétable.	81
26	Résultat de l'algorithme de PIV (librairie python OpenPIV)	82

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Motivation

La compréhension des systèmes côtiers représente un enjeu majeur pour l'humanité du 21e siècle. À l'interface de la terre et de la mer, les côtes font partie des environnements les plus productifs biologiquement (Sigman et Hain, 2012) et sont aussi ceux soumis aux plus fortes pressions d'origine anthropique (Zaucha et Gee, 2019). En effet, elles concentrent les activités humaines telles que le transport marchand, le développement industriel, résidentiel et récrétouristique. En 2001, 11.5 millions de Canadiens soit 38.3% de la population vivait dans une bande de 20 km le long des côtes. La tendance observée à l'époque prédisait que ce nombre atteindrait 16.75 millions en 2015, indiquant une densification de la population côtière (Manson, 2005). Dans ce contexte, il existe un besoin de développement des systèmes d'observation (*Priorities for Coastal Ecosystem Science* 1994), qui fournissent l'information permettant aux décideurs une prise de décision éclairée (Ricketts et Harrison, 2007).

Cadre scientifique

L'optique océanique répond au besoin de comprendre l'interaction entre la lumière, les constituants de l'eau de mer et les processus physiques, chimiques et biologiques. La lumière du soleil est la principale source d'énergie alimentant chaque jour le système terre. Étudier la lumière dans l'océan est important pour les quatre domaines de l'océanographie : la physique, la chimie, la biologie et la géologie. L'étude de l'interaction de la lumière avec les constituants optiquement actifs de l'eau de mer a mené à la création d'un nouveau champ d'études. En 1978 a été acquise la première image du *Coastal Zone Color Scanner* (CZCS) (Hovis et al., 1980), l'instrument conçu spécifiquement pour prouver que la radiométrie pouvait être utilisée pour quantifier le phytoplancton depuis l'espace. À ce moment, un nouveau domaine

d'étude océanographique est né : la télédétection optique océanique, aussi connu en anglais sous le terme *Ocean Color ou encore Ocean Color Radiometry* (OCR). Cette technique a augmenté notre capacité à étudier le système terrestre dans sa totalité, avec une résolution spatiale allant de plusieurs kilomètres à quelques centimètres (McClain, 2009). De plus, les mesures acquises avec une répétition allant de l'hebdomadaire à l'horaire nous donnent accès aux séries temporelles indispensables à la compréhension des processus dynamiques qui caractérisent les environnements océaniques, côtiers et estuariens (Groom et al., 2019).

La télédétection optique océanique par satellite est donc un outil utile dans chaque champ d'études de l'océanographie. Réciproquement, il est nécessaire d'acquérir des connaissances dans chacun de ces champs d'études pour étudier l'optique océanique. Une personne ne peut pas savoir pourquoi observer, quoi observer, ni comment observer, quand les processus d'intérêts se situent en dehors de sa base de connaissance. Dans ce sens, le spécialiste en télédétection optique océanique doit aussi être un généraliste de l'océanographie. Cette place est reconnue comme celle de l'océanographe en général (Olson, 1988). Si une personne peut être spécialisée en physique sans avoir besoin de comprendre les processus biologiques, elle peut difficilement faire de la biologie sans connaître les processus physiques et chimiques conditionnant la vie. Les techniques de télédétection optique satellitaire, quand utilisées à leur plein potentiel, permettent de combler les vides et de faire le lien entre chaque discipline de l'océanographie. En effet, en offrant une vue synoptique et en reliant les valeurs radiométriques aux processus impliqués dans leurs modifications, l'on peut obtenir une représentation continue des variables physiques, chimiques, biologiques et géologiques. En allant au-delà de la simple connaissance en soi de ces variables, la télédétection ouvre la voie à l'étude des interactions entre les différentes composantes d'un système, permettant de réaliser une synthèse systématique.

Malgré tout, la télédétection optique souffre de problèmes inhérents et pour certains insolubles, comme la présence de nuages couvrant régulièrement certaines zones et masquant la surface. Les algorithmes de corrections atmosphériques permettant de retrouver les réflec-

tances de l'eau sont nombreux, parfois mal documentés et leur validation reste incertaine. L'océan ne permet qu'à de faibles quantités de radiation de quitter la colonne d'eau. Les faibles valeurs que nous cherchons à retrouver sont donc très sensibles aux erreurs, pouvant dépasser largement leur variabilité naturelle. Ainsi, la précision des produits dérivés comme la concentration des matières particulières en suspension (MPS) peut être questionnable et limiter certaines applications. De plus, la télédétection satellitaire repose sur un ensemble de matériel et de logiciels spécifiques. Des capteurs embarqués sur les satellites dans l'espace aux serveurs stockant les données, la complexité et la diversité des infrastructures rend difficile leurs utilisation et interopérabilité; une chaîne de travail est souvent spécifique à un capteur et fournisseur de données et ne peut être adaptée qu'avec un important coût en temps. Ici, nous ne rentrerons pas plus avant dans cette problématique qui concerne principalement les agences spatiales et les fournisseurs de données. Nous nous intéresserons à une partie plus fondamentale de la télédétection, soit le développement et la validation des algorithmes.

Objectifs

L'objectif général de ce projet de recherche est d'utiliser la télédétection optique satellitaire pour contribuer à l'étude des systèmes côtiers, notamment en ce qui a trait aux apports fluviaux de MPS de MODC. Pour estimer les concentrations de MPS et de la matière organique dissoute colorée (MODC) par télédétection optique satellitaire, une méthode est la calibration régionale d'algorithmes empiriques. Cette méthode requiert l'utilisation de données mesurées *in situ* mettant en relation les propriétés optiques avec les concentrations en MPS et en MODC. Finalement, l'application de ces algorithmes à l'imagerie satellitaire doit être validée pour déterminer le niveau de confiance avec laquelle l'estimation est effectuée. Trois objectifs spécifiques sont donc définis comme suit.

Le premier objectif est d'assembler une base de données biogéochimiques et optiques acquises *in situ* au cours de quatre différents projets réalisés entre 2015 et 2019. Cet objectif

a donné lieu à la conception et à la réalisation d'une structure et d'un logiciel de gestion des données.

Le **deuxième objectif** est de développer et de valider des algorithmes de télédétection. Les algorithmes de télédétection sont les outils permettant de traiter le signal radiométrique enregistré par les capteurs pour produire les variables océaniques d'intérêt. Deux constituants optiquement actifs provenant principalement des apports fluviaux font l'objet de cette étude, soit les MPS et la matière organique dissoute colorée (MODC).

Le **troisième objectif** est d'effectuer la validation des algorithmes pour les données satellitaires des capteurs multispectraux *Operational Land Imager* (OLI) et *MultiSpectral Instrument* (MSI). À cette fin, six algorithmes de correction atmosphérique sont comparés : ACOLITE, C2RCC, C2X, iCOR, SeaDAS et SSP. Cet exercice appelé analyse de correspondance (*matchup analysis*) consiste à comparer les données *in situ* aux données de télédétection pour déterminer les marges d'erreur associées aux produits finaux.

Structure du mémoire

Ce mémoire présente le travail réalisé durant mes deux années de recherche au laboratoire AquaTel de l'UQAR. L'introduction générale continue en présentant le cadre théorique nécessaire à la compréhension de ce travail. Ensuite, une description des sites d'études permet au lecteur de situer les données dans leur contexte spatial et expose les principales différences entre les environnements échantillonés. Le premier chapitre expose une partie du développement conceptuel et logiciel que j'ai réalisé pour rationaliser le traitement, la gestion, l'assemblage et le contrôle de qualité des données complexes acquises dans différentes configurations par différents instruments et dans différentes dimensions. Le deuxième chapitre est constitué de l'article traitant du développement et de la validation des algorithmes de télédétection de la MODC et de la MPS, fruit de ce travail de recherche. Finalement, la conclusion générale apportera un point final à ces deux années, en exposant les avancées et

les limites présentées par ce travail. Elle ouvrira toutefois sur ce qui peut être fait pour l'améliorer et sur l'exploration de pistes pertinentes pour nous permettre de mieux comprendre la dynamique des systèmes côtiers.

Cadre théorique

Les méthodes d'acquisition des variables utilisées dans ce travail de recherche sont présentées dans l'article *Algorithme de télédétection pour estimer les MPS et la MODC dans les eaux côtières du Québec*. Cette section a pour but de définir les éléments du cadre théorique de ces méthodes et d'apporter les informations complémentaires pertinentes. La télédétection optique aquatique est basée sur l'exploitation du rayonnement électromagnétique passif, émanant du soleil et diffusé par les masses d'eau. Le rayonnement électromagnétique peut être défini spéctralement par sa longueur d'onde, notée λ . La télédétection optique consiste à associer un changement dans l'intensité lumineuse réfléchie par la colonne d'eau et sa forme spectrale, à l'interaction du rayonnement avec des matières spécifiques.

Les propriétés optiques intrinsèques de l'eau (IOPs)

L'absorption et la diffusion sont les deux interactions possibles entre le rayonnement électromagnétique et la matière. Comme ces propriétés dépendent exclusivement des caractéristiques physico-chimiques de la matière, elles sont définies comme étant intrinsèques (Mobley, 1994). L'eau que l'on trouve à la surface de la planète est un assemblage de matières, ou constituants, que l'on peut diviser selon leur forme dissoute et particulaire. En océanographie, la limite entre la matière dissoute et particulaire se définit opérationnellement entre 0.2 μm et 0.7 μm , dépendamment du type de filtre utilisé par la méthode de mesure. Les IOPs de l'eau, soit l'absorption, a (eq. 1) et la diffusion, b (eq. 2), peuvent donc se représenter comme la somme des IOPs de chaque constituant (Jerlov (1976); cité par Stramski et al. (2004) :

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + a_g(\lambda) + a_p(\lambda) \quad (1)$$

$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + b_p(\lambda) \quad (2)$$

ou a_w est le coefficient d'absorption de l'eau pure, a_g est le coefficient d'absorption de la matière organique dissoute colorée (g pour *gelbstoff* mot allemand se traduisant par "matière jaune"), a_p le coefficient d'absorption de la matière particulaire, b_w le coefficient de diffusion de l'eau pure et b_p le coefficient de rétrodiffusion de la matière particulaire. Comme ces propriétés optiques sont intrinsèques et ne dépendent pas de l'éclairement, il est possible de les mesurer aussi bien *in situ* qu'en laboratoire. Les mesures *in situ* des IOPs sont couramment réalisées à l'aide d'une cage optique (*optical package*), structure où différents instruments de mesure de l'absorption et de la diffusion sont montés en commun avec une sonde de salinité, de température et de profondeur (CTD). Ce type de configuration permet de réaliser des profils d'acquisition simultanée de ces variables fondamentales pour la caractérisation optique des masses d'eau. Les instruments montés sur la cage optique du laboratoire AquaTel incluent une sphère intégrante submersible (A-sphere), mesurant l'absorption spectrale totale ainsi qu'un Hydroscat-6, mesurant la rétrodiffusion à 6 longueurs d'onde. Des mesures en laboratoire sont faites pour déterminer a_p et a_g à l'aide d'un spectrophotomètre muni de deux faisceaux de lumière et d'une sphère intégrante pour les mesures de a_p sur filtre.

Variables radiométriques et propriétés optiques apparentes de l'eau (AOPs)

La télédétection ne permet pas de mesurer directement les propriétés optiques intrinsèques de l'eau. Les capteurs satellitaires mesurent la luminance au sommet de l'atmosphère L_{TOA} . Cette mesure inclut l'ensemble des effets atmosphériques en termes d'absorption et de diffusion, déterminant la luminance atmosphérique, L_a . Les méthodes de correction atmosphérique (AC) visent notamment à éliminer la contribution de L_a ainsi que d'autres contributions au signal L_{TOA} provenant de l'interface air-mer (p. ex : réflexion spéculaire du ciel ou du soleil ; écume de mer ou "white caps"), pour retrouver la luminance de l'eau L_w . La luminance de l'eau dépend des IOPs et de l'éclairement descendant E_d , deux caractéristiques

de la définition d'une AOP. Toutefois, sa forte variabilité en fonction de E_d la rend inadaptée en tant que descripteur stable des propriétés optiques d'une masse d'eau. Toutefois, le ratio L_w/E_d appelé réflectance marine (Antoine, 1998) ou en anglais *remote sensing reflectance*, R_{rs} , est défini comme étant une AOP. En effet, la normalisation de L_w par E_d , rend cette quantité suffisamment stable pour être un descripteur efficace des masses d'eau. L'on peut raisonnablement assumer qu'une variation de R_{rs} est principalement dû à un changement de composition de l'eau, et donc des propriétés optiques intrinsèques, plutôt qu'à un changement des conditions d'éclairement. L'acquisition des propriétés optiques apparentes de l'eau (AOPs) a été réalisée directement sous l'eau à l'aide de différents instruments et configurations. Dans l'EGSL, des radiomètres multispectraux montés sur un système de profilage optique compact (C-OPS) ont été utilisés. Dans la baie James, des radiomètres hyperspectraux pour la couleur de l'océan (HOCR) étaient maintenus à la surface à l'aide d'une perche. La R_{rs} est dérivée ici juste au-dessus de la surface (0^+) par l'extrapolation de la luminance ascendante dans l'eau juste en dessous de la surface ($L_u(0^-)$). $L_u(0^-)$ est ensuite transformée en $L_u(0^+)$ (ou L_w), soit la luminance ascendante juste au-dessus de la surface, par les constantes de Fresnel et de la transmittance radiante ascendante.

Zones d'études

La base de données utilisée durant ce travail de recherche a été compilée à partir des données acquises dans le cadre de cinq projets différents, menés entre 2015 et 2019. Quatre de ces projets ont été menés dans l'Estuaire et le Golfe du Saint-Laurent, soit la validation des données optiques de la bouée PMZA-RIKI, la validation du capteur MicroCASI à Forestville, CHONe pour la baie de Sept-Îles (BSI) et WISE-Man pour la péninsule Manicouagan. Pour sa part, le projet COast-JB s'est déroulé sur la côte est de la Baie James. Une brève description de chaque projet ou site d'étude est présentée ci-dessous.

La Baie de Sept-Îles

La BSI (Figure 1) est située sur la Côte-Nord dans le Golfe du Saint-Laurent. La baie est bordée à l'Est par la rivière Moisie et à l'ouest par la rivière Sainte-Marguerite, quatre plus petites rivières, Hall, aux Foins, du Poste et des Rapides se jettent directement dans la baie. Son embouchure d'une largeur de 5 km et son plus large diamètre de 13 km la caractérisent comme baie fermée. La BSI a été échantillonnée en 2016, 2017 et 2019 dans le cadre du Canadian Healthy Ocean Network (CHONe) en collaboration avec l'Institut Nordique en Recherche en Environnement et en Sécurité au Travail (INREST), pour un projet multidisciplinaire visant à évaluer l'impact des activités industrialo-portuaires sur l'environnement de la baie. Dans le fond de la baie, l'on retrouve des herbiers de zostère marine (*Zostera marina* L.), une espèce reconnue d'importance écologique à l'échelle du Canada (DFO, 2009). Un C-OPS a été utilisé pour mesurer les propriétés optiques apparentes de l'eau. Une cage optique a été déployée pour acquérir des profils d'absorption et de rétrodiffusion totale dans la colonne d'eau. Au final, 112 stations viennent contribuer à la base de données. La très grande majorité des stations était optiquement profonde.

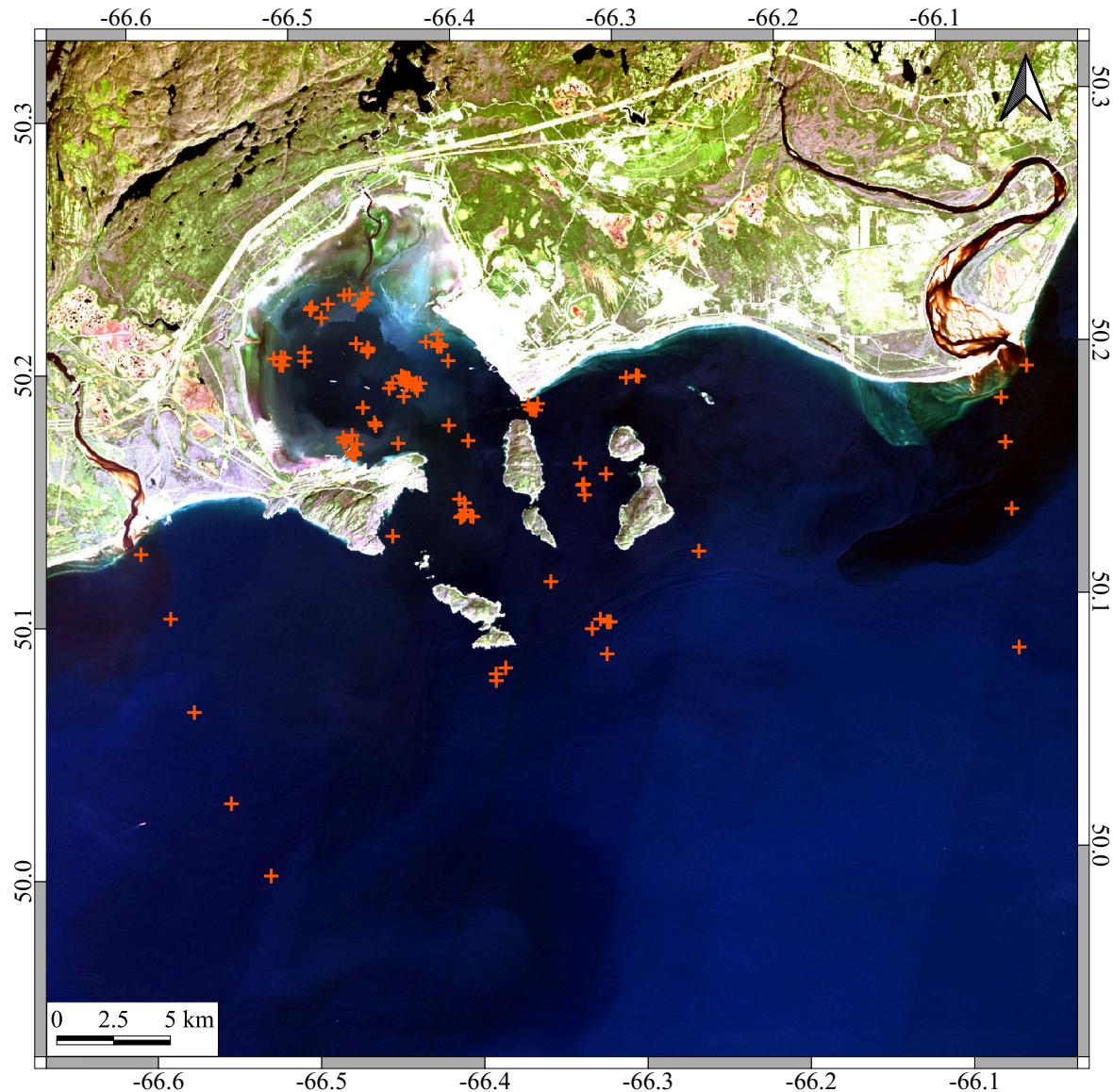


Figure 1: Composé RGB de la baie de Sept-Îles vue le 17/09/2019 par le capteur OLI à bord du satellite Landsat 8. Les croix oranges correspondent aux positions des échantillons de la base de données.

La péninsule Manicouagan

Située dans l'estuaire maritime du Saint-Laurent, la péninsule Manicouagan (Figure 2) est caractérisée par un plateau intertidal s'étendant à plus d'un kilomètre de la côte. Dans cette zone se situent plusieurs herbiers de *Z. Marina*. La péninsule est bordée à l'ouest par la Rivière-aux-Outardes et à l'est par la rivière Manicouagan. En 2019, le projet WISE-Man visant à démontrer les capacités de l'imagerie hyperspectrale dans les environnements côtiers a été mis en place. Ce projet comprenait deux volets d'acquisition de données, d'une part d'imagerie hyperspectrale aéroportée et d'autre part des données optiques et biogéochimiques *in situ*. Durant cette campagne, deux bateaux ont servi de plateforme d'acquisitions principales. Chaque embarcation était équipée d'un C-OPS pour les AOPs et d'un profileur d'IOP. Les instruments et leurs configurations étaient toutefois différents, l'effort supplémentaire nécessaire pour intégrer ces données de manière consistante s'est révélé un précieux exercice de gestion des données. Le projet WISE-Man ajoute 61 stations à la base de données. Quelques stations ont été réalisées dans les eaux optiquement peu profonde dans la zone intertidale de la péninsule.

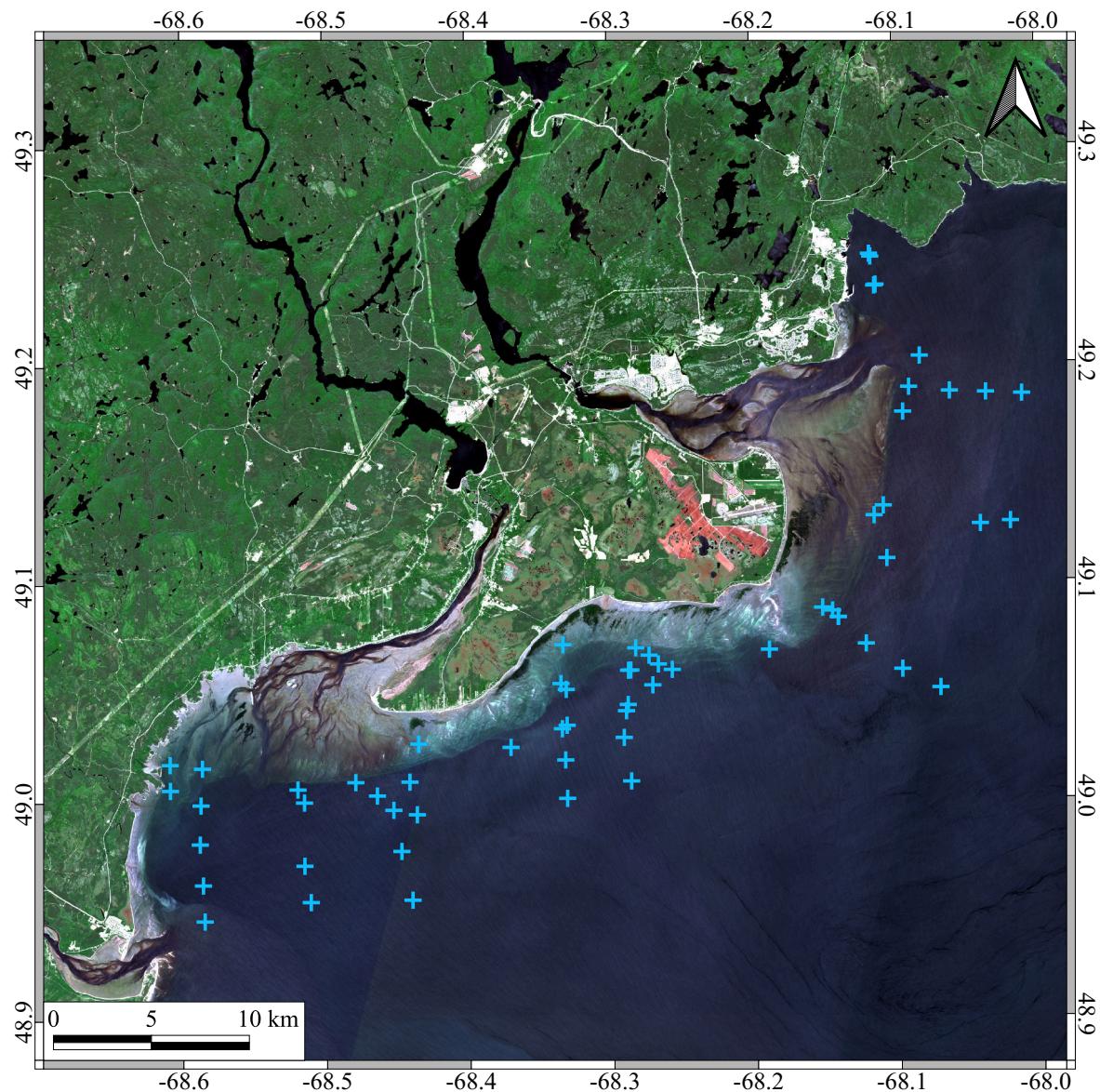


Figure 2: La Péninsule Manicouagan vue le 13/06/2021 par le capteur MSI à bord du satellite Sentinel 2. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.

Forestville

Le secteur de Forestville est situé sur la côte nord de l'estuaire maritime du Saint-Laurent (Figure 3), proche de la péninsule Manicouagan. Les mesures ont été effectuées le long d'une plage de sable aux pieds des falaises en septembre 2017. Contrairement à la BSI où à la péninsule Manicouagan, aucune embouchure de rivière n'est située à proximité directe de ce site. Ces données ont été acquises incidemment au survol du capteur hyperspectral microCASI à des fins de validations. Au total 6 mesures coïncidentes de R_{rs} provenant du C-OPS, de concentration en MPS et en CDOM sont incluses dans la base de données. Ces stations étaient optiquement profondes.

L'estuaire maritime du Saint-Laurent

Située dans l'estuaire maritime du Saint-Laurent (Figure 3) en aval de la zone d'upwelling de la tête du Chenal Laurentien associé à une forte productivité primaire (Therriault et Lacroix, 1976), la bouée océanographique PMZA-RIKI (anciennement IML-4) fait partie du Programme de Monitorage de la Zone Atlantique (PMZA). La profondeur de l'estuaire à la station est de l'ordre de 300 mètres. La bouée embarque des capteurs multispectraux pour mesurer les propriétés optiques de l'eau à cette station. En 2015 et 2016, des mesures d'AOPs et d'IOPs ont été réalisées à l'aide d'un C-OPS et d'une cage optique, pour évaluer la qualité des données optiques fournies par la bouée (Bélanger et al., 2017). Il est attendu que les 22 mesures provenant de ce projet augmentent la diversité des conditions océanographiques optiques de la base de données.

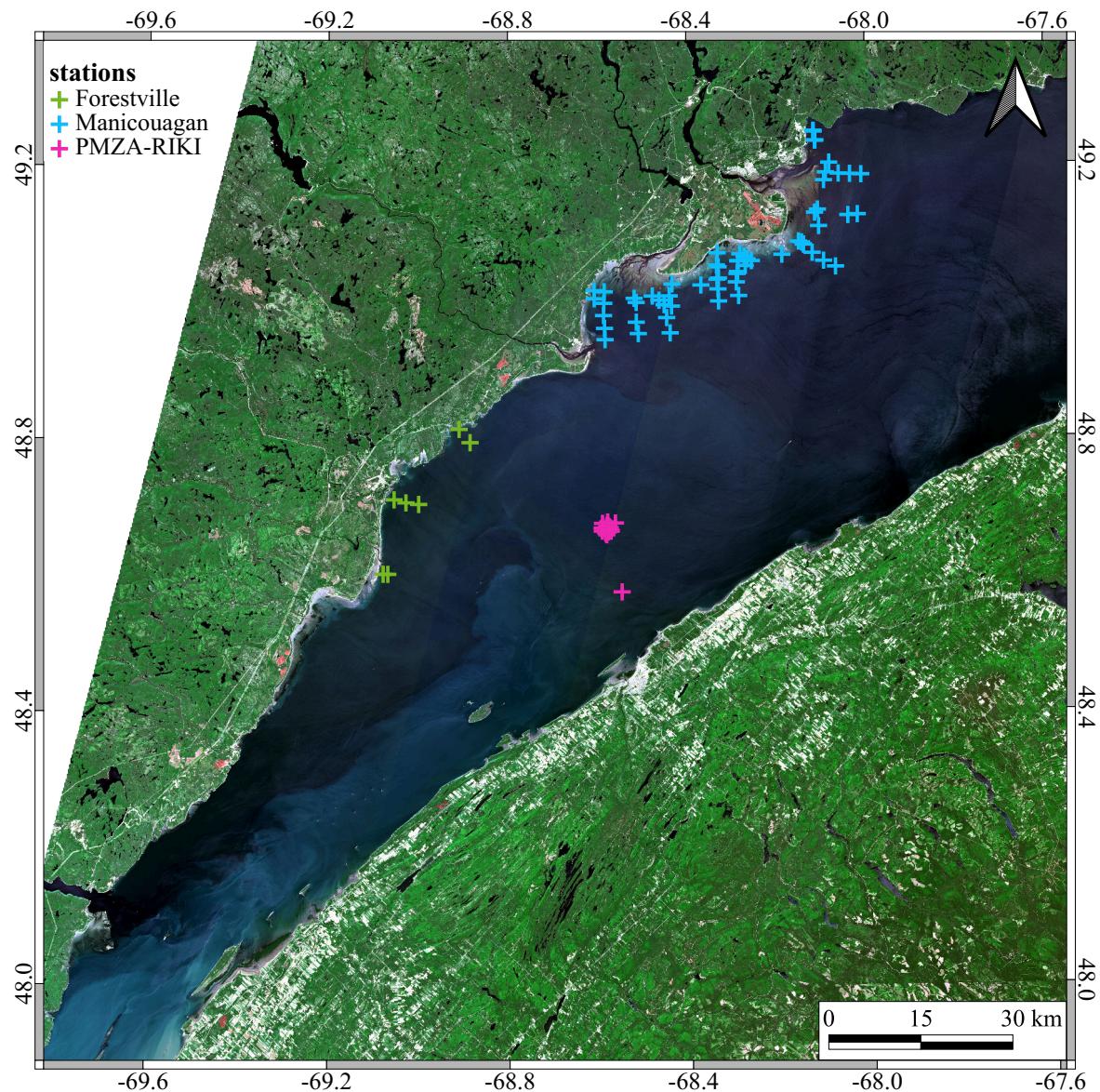


Figure 3: L'estuaire du Saint-Laurent vu le 13/06/2021 par le capteur MSI à bord du satellite Sentinel 2. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.

La Baie James

La baie James, située au sud de la baie d'Hudson, à une superficie d'environ 67 000 km^2 et une profondeur moyenne de 28 m (El-Sabh et Koutitonsky, 1977). L'Eeyou Istchee, le territoire des Cree, est situé en partie le long de la côte est de la Baie James. C'est le long de cette côte, entre Eastmain et Chisasibi, que le projet COast-JB a pour mission de comprendre l'origine du déclin des herbiers de *Z. Marina*. Réalisé en partenariat avec la corporation Niskamoon, ce sujet est d'une importance cruciale pour les Cree de la baie James. Autrefois reconnu pour ses riches herbiers de *Z. Marina* (Lalumière et al., 1994), ceux-ci connaissent un déclin marqué depuis la fin des années 1990. Cette diminution impacte les traditions des Cree chassant la sauvagine au printemps et à l'automne, lors du passage des oiseaux sur leur route migratoire. Le but du projet Coast-JB est notamment de mieux comprendre les conditions océanographiques dans lesquelles se développent les herbiers, dont les facteurs contrôlant la disponibilité en lumière. Dans le cadre de ce projet, les AOPs et les IOPs ont été mesurées en surface uniquement, à l'aide des radiomètres HOCLR et des rétrodiffusiomètres ECO-VSF (2018) et BB3 (2019). Les données acquises en 2018 et 2019 totalisant 161 stations sont incluses dans la base de données. La plupart des stations étaient situées à proximité des herbiers, mais considérant la forte atténuation de la lumière dans la colonne d'eau, la majorité des stations étaient optiquement profondes.

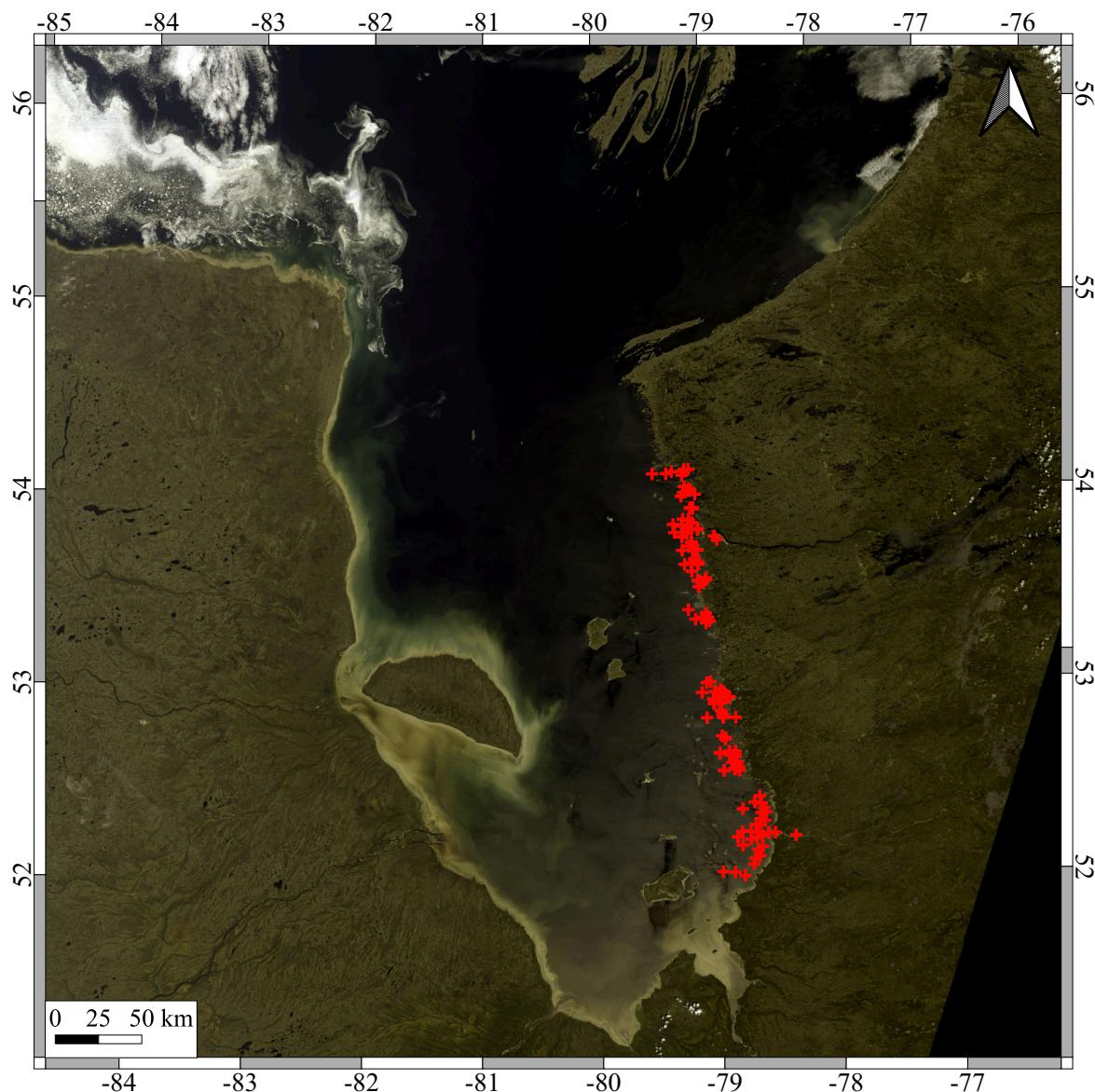


Figure 4: La baie James vue le 11/07/2021 par le capteur OLCI à bord du satellite Sentinel 3. Les croix correspondent aux positions des échantillons de la base de données.

CHAPITRE 1

LA GESTION DES DONNÉES, DE L'ACQUISITION À L'ANALYSE

La mise en commun des données provenant des projets PMZA-RIKI, CHONe, WISE-Man et COast-JB pour le développement des algorithmes est rapidement devenue problématique. Les différents projets n'étant pas organisés selon une structure et avec une nomenclature commune, il aurait été nécessaire d'écrire un code sur mesure pour chaque projet et variable à intégrer à la base de données. De plus, des données telles que les AOPs ont un cycle de vie particulier, caractérisé par un traitement itératif, car elles peuvent bénéficier de variables conjointes pour améliorer leur qualité. Par exemple, les mesures effectuées avec le C-OPS doivent être corrigées pour l'ombre générée par l'instrument. Le facteur de correction appliqué dépend de l'absorption de la masse d'eau. Ainsi, l'absorption mesurée *in situ* par la A-sphère ou l'absorption du CDOM additionné à l'absorption particulaire mesurée en laboratoire peuvent être utilisées pour améliorer la qualité des données du C-OPS. Il est important de noter ici que face à la quantité et à la diversité des données acquises et des méthodes associées, plusieurs personnes sont impliquées à différents moments de leurs acquisitions et de leurs traitements. Le travail de traitement est donc hautement collaboratif. Un premier traitement des données du C-OPS a été réalisé avant d'obtenir les données d'absorption. Une fois celles-ci disponibles, les données du C-OPS ont été traitées à nouveau pour intégrer l'absorption à la correction de l'ombre de l'instrument. Cet aspect collaboratif et itératif du cycle de vie des données rend d'autant plus nécessaire l'implémentation d'outils d'automatisation basée sur une logique commune. Pour ce faire le développement d'une nouvelle librairie R, lighthouse (<https://github.com/raphidoc/lighthouse>), a été initié. Le rôle de cette librairie est d'être à la fois une méta-librairie et le répertoire des outils structurant la gestion des données. C'est une méta-librairie dans le sens où elle doit harmoniser en termes de style, de nomenclature et d'entrée/sortie, les cinq librairies de traitement développées aux laboratoires

d’Océanologie de Villefranche (Cops) et Aquatel (HyperocR, asdsvc, RspecstroAbs) au cours de la dernière décennie. C’est aussi un élément structurant dans le sens où les fonctions automatisant et régissant la gestion des données y sont définies. Les sections suivantes décrivent succinctement la logique et les outils que j’ai mis en place dans le cadre de ce projet.

1.1 Une structure générique

Pour rationaliser et automatiser la gestion des données, il a été nécessaire de définir une structure fixe (Figure 5), suffisamment spécifique pour assurer l’intégrité des données, mais aussi suffisamment générique pour assurer leur intégration à travers différents projets et configurations. Une ébauche de ce type de structure pour le stockage et le traitement des données C-OPS et des propriétés optiques intrinsèques existait déjà au laboratoire Aquatel. Les données acquises sur le terrain doivent être stockées au jour le jour de manière à permettre une sauvegarde et un traitement efficace. À cette fin, on définit le niveau 1 (L1) comme étant un espace de stockage et d’archivage uniquement organisé par ensemble. Un ensemble est défini par une méthode d’acquisition : le C-OPS, la cage optique, les échantillons d’eau, tout ce qui fait que des données associées sont acquises de manière "indivisible". L’accès à cet espace doit se faire en lecture seule, aucune modification ne doit être faite sur les données à ce niveau. L’espace de traitement des données est défini comme étant le niveau 2 (L2). Ici, les données sont organisées par ensemble cohérent, c’est-à-dire par station ou par transect, chacune correspondant à un sous-dossier de ce niveau. À l’intérieur de ce sous-dossier, l’on retrouve les ensembles définis dans le L1. C’est sur ces copies des données que le traitement des données est réalisé. Les fichiers peuvent être modifiés pour ne garder que les données de bonne qualité. Les résultats du traitement sont aussi stockés directement à ce niveau et peuvent être réécrits à chaque nouveau traitement, ce n’est donc pas un espace de stockage des données finales.

Un niveau spécifique est dédié à cet effet, le niveau 3 (L3). Dans cet espace de sto-

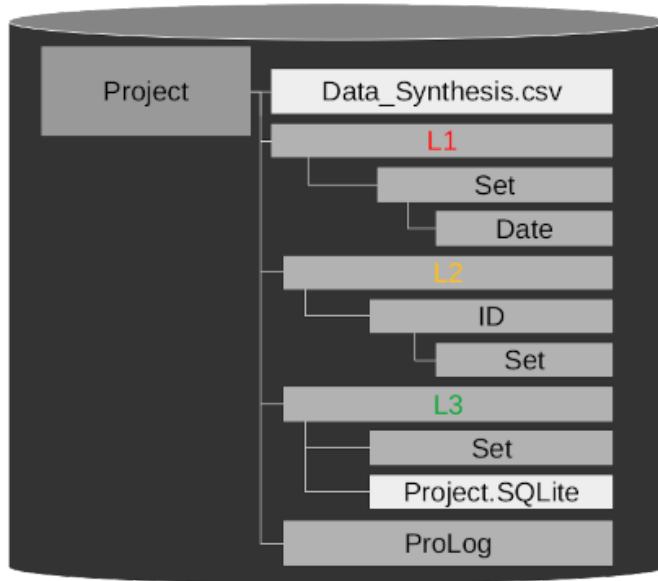


Figure 5: Schéma de la structure générique de stockage et de traitement des données..

stockage entièrement automatisé, les données sont stockées par table au format csv ; chaque table correspond à un ensemble : C-OPS, cage optique, échantillon d'eau. Ces tables sont ensuite stockées dans une base de données SQLite. Finalement, nous avons donc une base de données SQLite par projet, avec la même structure et la même nomenclature. Ces bases de données peuvent donc être assemblées automatiquement pour générer une base de données globale. C'est cette dernière qui est ensuite interrogée pour extraire les variables nécessaires à l'analyse.

1.2 Du concept à la réalité

Un élément primordial d'une gestion des données appropriée est la compréhension et la définition précise des éléments constituant une base de données. À cet égard, la définition de l'unité observationnelle peut devenir problématique. En effet, la principale unité observationnelle de notre base de données est la station. La station peut être définie comme étant un point dans l'espace à la surface de l'eau et dans le temps. Dans notre base de données,

son identifiant unique ou sa clé est donc {Lat, Lon, DateTime}. Problème, la clé Lat, Lon, DateTime propre à une station n'est pas constante et connaît une dérive spatiale et temporelle lors des mesures successives. L'analyse de cette dérive par le biais des métadonnées peut s'avérer cruciale à la compréhension des problèmes de qualité des données. Pour illustrer ce propos, nous pouvons observer l'exemple de la station MAN-F05 du projet WISE-Man. Assez tôt dans l'analyse des données, un point sortant d'une distribution a été repéré (point encerclé de rouge, Figure 6). La première action a donc été de retourner au niveau du traitement des données du C-OPS et de l'absorption du CDOM (MODC) tout en inspectant la page du livre de bord contenant les métadonnées de la station, inscrites lors de la collecte. Les quatre profils (*casts*) de C-OPS sont indiqués sur le livre de bord comme étant de bonne qualité et en effet, bien qu'ils diffèrent, les quatres spectres de R_{rs} dérivés des mesures du C-OPS semblent corrects (Figure 7). À ce niveau, notons que le premier profil à été acquis à 18 h 18 et le quatrième à 18 h 22. Il est indiqué que la profondeur de la station varie entre 6 et 7 mètres, les profils de C-OPS sont donc relativement courts, leur durée est apparemment inférieure à une minute. Un fait marquant au regard de cette information est la différence entre les spectres de R_{rs} . La R_{rs} à 550 nm du profil 001 est située entre le maximum et le minimum, qui sont respectivement mesurés par le profil 003 et 004. L'acquisition des données à la station MAN-F05, située proche de l'embouchure de la rivière Manicouagan, a pu se dérouler comme suit. Le C-OPS a été déployé en premier à l'arrivée au point GPS de la station. Le profil 001 a été réalisé dans environ 6,77 m d'eau, ce profil est indiqué comme optiquement peu profond, car l'instrument a enregistré une augmentation de la réflectance en profondeur, due à la réflectance du fond. La dérive a emmené le bateau dans des eaux moins profondes et la R_{rs} à 550 nm a augmenté proportionnellement pour les profils 002 et 003, réalisés à des profondeurs de 5.86 et 5.46 m respectivement. Se rendant compte de la dérive et/ou du changement de couleur de l'eau, le bateau a été ramené au point GPS de la station avant d'acquérir le profil de C-OPS 004 à 18 h 22 dans une profondeur supérieure à 8 m, où aucune augmentation de la radiance ascendante n'est visible en profondeur. Bien que l'hypothèse de la réflectance du fond expliquant l'augmentation de la R_{rs} à 550 nm soit préférée

dans les eaux optiquement peu profondes, l'on peut formuler une autre hypothèse. Le profil 001 a été réalisé proche du front du panache de la rivière Manicouagan, dans une masse d'eau à la concentration en CDOM élevée (Figure 8). La dérive et/ou le déplacement des masses d'eau à ensuite éloigné le bateau du panache, la concentration en CDOM a donc diminuée et la R_{rs} à 550 nm a augmenté. Se rendant compte de la dérive et/ou du changement de couleur de l'eau, le bateau a été ramené au point GPS de la station avant d'acquérir le profil de C-OPS 004 à 18 h 22. La première analyse de la relation $a_g(440)$ vs $R_{rs}(560)/R_{rs}(665)$ a été réalisée avec la moyenne de la R_{rs} des quatre profils de la station MAN-F05 (Figure 6A). La position du point par rapport à la distribution indique que le signal de réflectance est anormalement élevé pour la concentration de CDOM correspondante. En enlevant les profils 002 et 003 et en ne gardant que la moyenne des profils 001 et 004 (Figure 6B), à la R_{rs} plus faible, le point se rapproche logiquement de la distribution. Considérant que la station a été échantillonnée pendant plus d'une demi-heure, il est probable que le bateau ait dû être ramené en position à plusieurs reprises. Dans ce contexte, il est difficile d'associer avec confiance des mesures effectuées à 30 minutes d'intervalle dans un environnement changeant si rapidement. La décision de conserver ou de supprimer un point de donnée peut donc rapidement devenir très subjective. C'est pourquoi l'ensemble des données de qualité dans la mesure, comme celles de la station MAN-F05, ont été conservées. Seules les données montrant des défauts évidents ont été retirées de l'analyse.

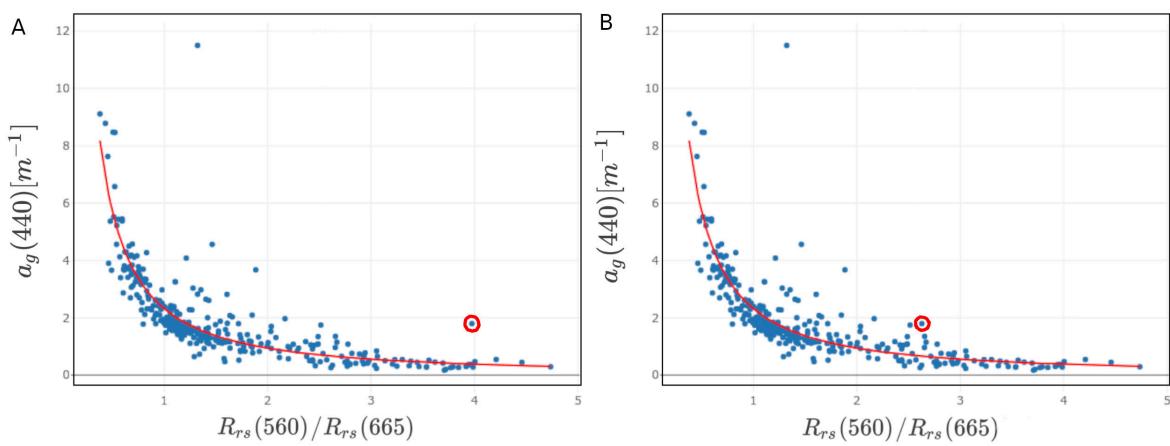


Figure 6: Analyse de la relation entre le CDOM et le ratio de bande $R_{rs}(560)/R_{rs}(665)$, (A) première analyse, (B) après réanalyse de la station MAN-F05 (point encerclé en rouge)

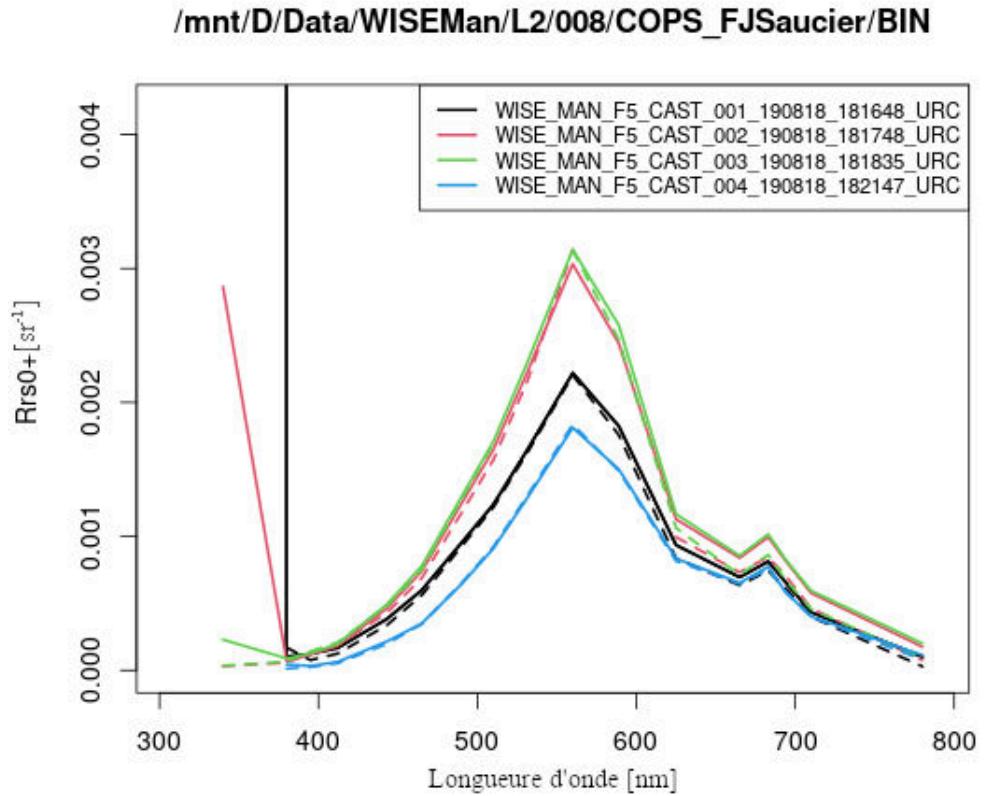


Figure 7: Spectre de R_{rs} dérivé du C-OPS à la station MAN-F5. Les lignes continues et pointillées correspondent à l'extrapolation de $L_u(0^+)$ avec une méthode non-linéaire (LOESS) et linéaire, respectivement.

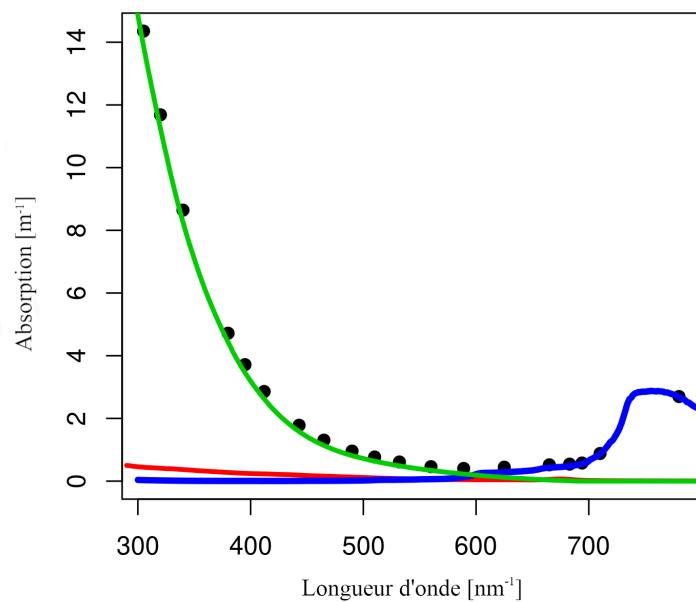


Figure 8: Spectre d'absorption utilisé pour la correction de l'ombre du C-OPS à la station MAN-F05. Les lignes verte, rouge et bleu correspondent respectivement à l'absorption due au CDOM, aux MPS et à l'eau. Les points correspondent à l'absorption totale.

1.3 Contrôle de la qualité des données

Comme nous le révèle l'exemple de la station MAN-F05, la capacité d'explorer une base de données pour l'ensemble des informations qu'elle contient est cruciale pour le contrôle de qualité des données. Ces informations sont les données en elles-mêmes ainsi que toutes les métadonnées nécessaires à la création d'un contexte indispensable à la compréhension des données. Ces métadonnées contiennent toutes les informations environnementales indiquées dans le livre de bord, mais aussi celles relatives au traitement, dont les décisions et actions prises par les humains responsables de celui-ci. L'écriture automatique de rapports de traitement, compilant et rendant accessibles interactivement ces informations, est à cet égard une avancée majeure. Dans le cadre de cette thèse, pour contrôler la qualité des données, j'ai tiré parti de l'interactivité offerte par les librairies *R* telles que *crosstalk*, *leaflet*, *DT*, *plotly* et *flexdashboard*. Ces librairies permettent de générer des filtres, cartes, tableaux de données, graphiques, en utilisant JavaScript directement à partir de *R*. La figure 9 est une image du panneau généré automatiquement lors de la création d'une table de données des MPS, lors du passage du niveau L2 vers le niveau L3. Pour ce faire, on appelle la fonction *l3_gen_water_sample* avec les paramètres requis et les options désirées. Le programme informatique va alors s'occuper de trouver les données de MPS du projet et les variables associées utiles au contrôle qualité et disponibles en L3, comme les profils de température et de salinité permettant d'avoir une idée de la stratification des masses d'eau échantillonées (Figure 9, encadré C) ou la rétrodiffusion particulière directement reliée à la concentration de MPS (Figure 9, encadré D). Le programme va aussi chercher une table appelée *SPM_processing_log.csv*, si celle-ci n'existe pas, elle sera créée. Dans cette table (Figure 9, encadré A) sont enregistrées toutes les informations relatives au traitement des MPS. Il est possible de supprimer des réplicats jugés douteux ainsi que d'inscrire les commentaires propres au traitement. La table *Sample Statistic* (Figure 9, encadré B) donne les statistiques associées à un échantillon comme le coefficient de variation des réplicats. À chaque fois que la fonction *l3_gen_water_sample* est appelée, la base de données en L3 et le tableau sont

mis à jour automatiquement. Les anciennes versions sont conservées dans un fichier d'archive compressé, elles peuvent donc être restaurées si besoin. Ce type de procédure est pour l'instant mis en place pour les échantillons d'eau, le C-OPS et la cage optique. Une fois les données placées dans le niveau L3, elles sont considérées comme prêtes pour analyse.

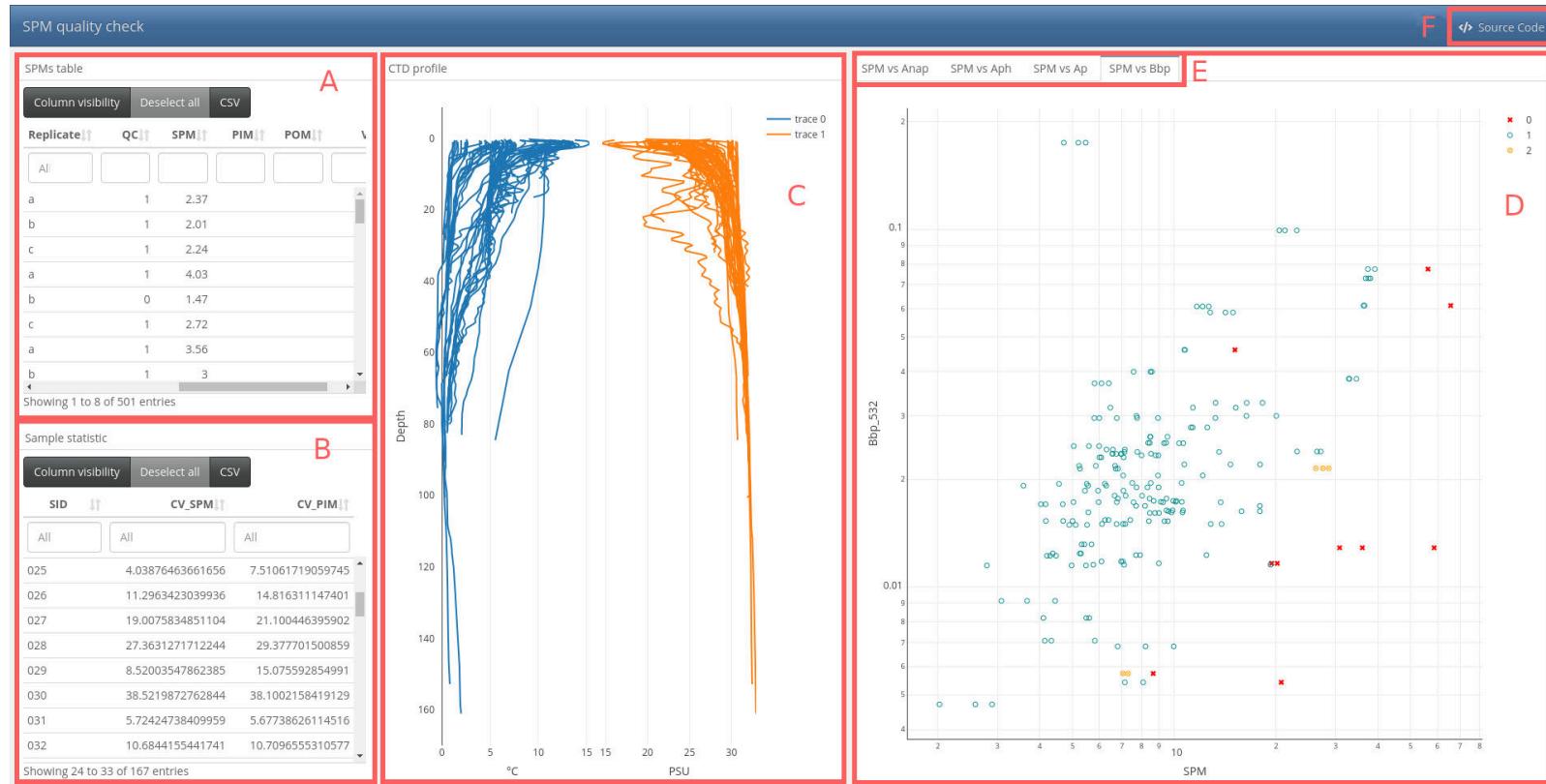


Figure 9: Tableau interactif pour le contrôle qualité des données de SPM pour le projet CHONe. (A) Table des valeurs par réplica, (B) table des statistiques par échantillon, (C) profils CTD, (D) graphiques des relations CSPM avec les variables pertinentes disponibles au moment de la production du tableau, (E) en tête de sélection des graphiques, (F) accès au code source du panneau.

1.4 Favoriser l'exploration des données

La base de données finale comporte une importante quantité de variables interreliées à différents niveaux. Pour développer une connaissance générale de la base de données, j'ai réalisé un panneau de contrôle contenant l'information associée aux stations ainsi qu'une représentation graphique des spectres de réflectance et des propriétés optiques intrinsèques (Figure 10). La capacité à sélectionner et filtrer les données affichées s'est avérée très pratique pour effectuer les vérifications sur des points de données problématiques au fur et à mesure de l'analyse. La carte interactive permet notamment de localiser ces points de données et de contextualiser leur acquisition avec les métadonnées des stations. Les graphiques de R_{rs} et des IOPs favorisent la compréhension intuitive de la relation entre propriétés optiques apparentes et intrinsèques. Ils permettent aussi d'évaluer rapidement les problèmes potentiels de qualité. Ces outils tirent parti de la fiabilité de la mémoire informatique et des capacités d'association et de compréhension de l'être humain, afin de permettre aux chercheurs de se concentrer sur ce qu'ils font le mieux, découvrir. Le temps consacré à la conception de la structure de gestion des données, ainsi que celui passé à l'écriture des codes la rendant opérationnelle, a permis d'avancer avec confiance vers l'analyse des données. Sans la pose de cette fondation, toute avancée dans l'analyse des relations entremêlées de l'optique océanique et des constituants de l'eau de mer aurait souffert du doute fondamental de la qualité des données. Ces outils ont le potentiel de favoriser et de faciliter la collaboration entre les chercheurs. Pour atteindre cet objectif de nombreux développements sont encore nécessaires, une première phase d'intégration au laboratoire Aquatel permettrait de poser les bases d'un transfert vers la communauté de l'optique océanique.

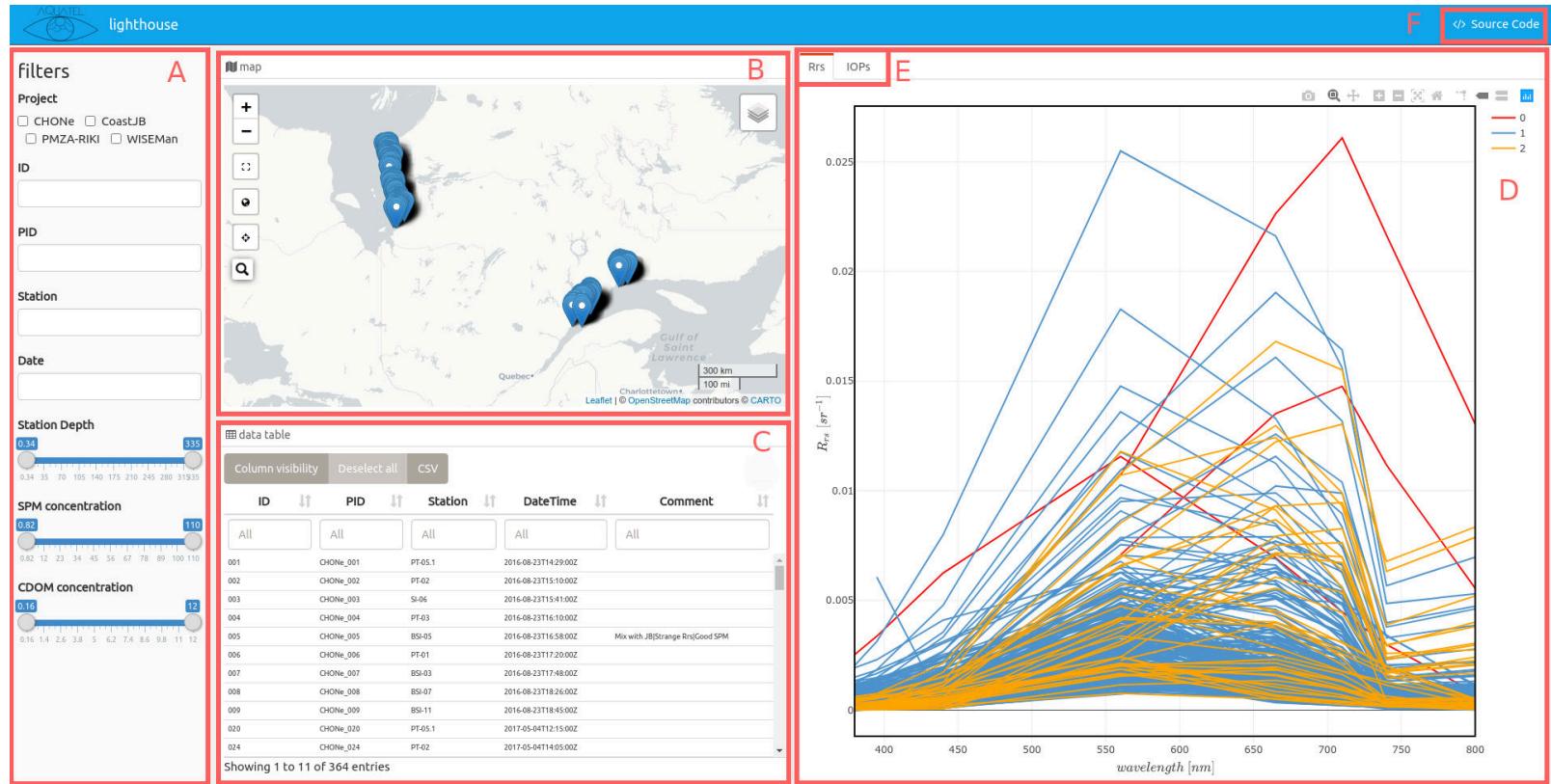


Figure 10: Tableau interactif pour l’exploration de la base de données globale. (A) Panneau des filtres pour réduire la quantité de données affichées, (B) Carte de localisation des stations d’échantillonnage, (C) table des métadonnées associées à chaque station, (D) graphique des données optiques, (E) en tête de sélection du graphique (R_{rs} ou IOPs), (F) accès au code source du tableau.

CHAPITRE 2

ALGORITHMES DE TÉLÉDÉTECTION POUR ESTIMER LA MPS ET LA MODC DANS LES EAUX CÔTIÈRES DU QUÉBEC

Contribution

Cet article présente le développement et la validation des algorithmes régionaux de télédétection destiné à estimer deux indicateurs de la qualité de l'eau, soit le coefficient d'absorption de la matière organique dissoute colorée (MODC) et la concentration de matière particulaire en suspension (MPS). Il sera soumis à la revue *Frontiers in Remote Sensing* pour publication dans le numéro spécial *Uncertainties and Challenges in Water Color Remote Sensing in Coastal and Inland Waters*. Il fut corédigé par moi-même, le professeur Simon Bélanger ainsi que mes collègues Carlos A.S. Araùjo, et Rakesh Kumar Singh. Ma contribution à ce travail fut le traitement des données du C-OPS et de MPS, l'analyse des données et le développement des algorithmes, l'exercice de validation par comparaison des mesures *in situ* et satellitaire avec différents algorithmes de correction atmosphérique, ainsi que la rédaction de l'article. Le professeur Simon Bélanger a dirigé ce projet en apportant son expertise scientifique sur le sujet. Il a écrit une part importante de la section méthode de cet article et a aidé à sa révision complète. Carlos A.S. Araùjo a contribué au traitement des données et à leurs analyse, il a apporté l'idée de l'exercice de validation et a participé à la révision de l'article. Rakesh Kumar Singh a amené l'idée de la comparaison des algorithmes de correction atmosphérique et une aide indispensable à sa réalisation, il a aussi contribué à la révision de l'article.

Résumé

Les apports fluviaux de matière particulaire en suspension (MPS) et de matière organique dissoute colorée (MODC) sont les principaux constituants optiquement actifs rencontrés dans les eaux côtières. Les capteurs satellitaires optiques à moyenne et haute résolution, tels qu'*Operational Land Imager* (OLI) à bord du satellite Landsat-8 et *MultiSpectral Instrument* (MSI) sur le satellite Sentinel-2, offrent une vue synoptique des systèmes côtiers à haute résolution spatiale (10-30 m) sur une base hebdomadaire, permettant l'étude de la dynamique côtière (e.g., panaches de rivières, remise en suspension des sédiments, etc.). L'estimation précise de la MODC et des MPS depuis l'espace nécessite l'adaptation régionale des algorithmes bio-optiques. Utilisant un jeu de données *in situ* des mesures de MODC, MPS et des propriétés optiques (apparentes et intrinsèques) provenant de différentes campagnes de terrain conduites dans les eaux côtières de l'Estuaire et du Golfe du Saint-Laurent (EGSL) et de l'est de la Baie James (BJ), des algorithmes régionaux ont été développés spécifiquement pour plusieurs capteurs satellitaires multispectraux, dont les capteurs OLI et MSI. Les résultats montrent que l'absorption de la MODC à 440 nm peut être estimée par l'utilisation d'un seul algorithme basé sur un ratio de réflectance de la bande rouge sur la bande verte, valide autant pour l'EGSL que pour la BJ. L'estimation de la concentration des MPS requiert des algorithmes régionaux pour l'EGSL et la BJ, ceci à cause de différences dans la nature des particules, telle qu'exprimée par leurs propriétés optiques intrinsèques par unité de masse. Finalement, l'application de ces algorithmes aux images satellitaires OLI et MSI correspondant aux points d'acquisition *in situ*, à montré que l'algorithme de correction atmosphérique C2RCC (*case 2 regional coast color*) donne les meilleurs résultats pour estimer la R_{rs} . Cependant, l'algorithme ACOLITE donne les meilleurs résultats pour l'estimation de la MODC, alors que les réseaux de neurones et le SSP (*spectral shape parameter*) offrent de meilleurs résultats pour l'estimation des MPS. On conclut que le choix de l'algorithme dépend du paramètre qu'on désire estimer.

2.1 Remote sensing algorithms to retrieve SPM and CDOM in Québec coastal waters

Abstract

Fluvial inputs of suspended particulate matter (SPM) and coloured dissolved organic matter (CDOM) are the primary optical constituents found in most Canadian coastal waters. Moderate and high-resolution satellite optical sensors, such as Operational Land Imager (OLI) on Landsat-8 and the MultiSpectral Instrument(MSI) on Sentinel-2, now offer a synoptic view at high spatial resolution (10 - 30 m) of coastal systems at a weekly temporal resolution allowing the study of coastal dynamics (e.g., river plumes, sediment resuspension events). Accurate estimations of CDOM and SPM from space requires regionally tuned bio-optical algorithms. Using an extensive *in situ* data set of CDOM, SPM, and optical properties (both apparent and inherent) from various field campaigns carried in coastal waters of the Estuary and Gulf of St. Lawrence (EGSL) and eastern James Bay (JB), we developed regional algorithms for OLI and MSI sensors. We found that CDOM at 440 nm can be retrieved using a single band ratio of green-to-red for both EGSL and JB. At the same time, SPM algorithms required regional adjustments due to difference in the distinct nature of the particles, as indicated by their mass-specific inherent optical properties. Finally, the application of those algorithms to satellite images corresponding with *in situ* acquisition points, showed that the atmospheric correction algorithm C2RCC gives the best results in terms of absolute R_{rs} retrieval. However, the ACOLITE algorithm gives the best results for CDOM estimation, while neural networks and SSP (spectral shape parameter) offer better results for SPM estimation. We conclude that the choice of the algorithm depends on the parameter one want to estimate.

2.2 Introduction

The ability to operationally monitor coastal waters constituents such as chromophoric dissolved organic matter (CDOM, see Table 1 for symbols and acronyms) and suspended

particulates matter (SPM) is critical to better understand the coastal system in terms of physical, chemical and biological processes. These optically active constituents are driving light penetration in aquatic environments and major biogeochemical (e.g., van der Molen et al., 2017) and photochemical processes (e.g., Zhang and Xie, 2015). During the last decade, new sensors with spatial resolution of 10 to 30 metres have improved our ability to observe the spatial variability of ocean colour in coastal areas, whereas it was primarily an issue (e.g., Aurin et al., 2013). As a result, high-resolution optical sensors such as the operational land imager (OLI) onboard Landsat-8 and the MultiSpectral Instrument (MSI) on-board Sentinel-2 platforms have shown their value as monitoring tools for optically active constituents (e.g., Chen et al., 2020; Normandin et al., 2019). They allow studying the spatial and temporal dynamics of these constituents in unprecedented ways (Li et al., 2019; Osadchiev and Sedakov, 2019; Vanhellemont and Ruddick, 2014). On one hand, locally-tuned bio-optical algorithms, are needed for accurate retrieval of optically active constituents from operational multispectral sensors due to the great optical diversity found in contrasting coastal zones (e.g., Zheng and DiGiacomo, 2017). On the other hand, prior to the application of bio-optical algorithm, satellite imagery need to be corrected for atmospheric contribution to the measured signal at the top-of-atmosphere. Atmospheric correction algorithms development is an active field of research and the number of available models have increased significantly over the last decade (Pahlevan, Mangin, et al., 2021).

Nearshore coastal waters of Québec, specifically the eastern shore of James Bay and the north shore of the estuary and Gulf of St. Lawrence (EGSL), are under the freshwater runoff's influence from the numerous rivers draining the boreal Canadian shield watersheds. The EGSL is one of the major subarctic estuaries characterized by high phytoplankton production sustained by nutrient-rich upwellings in the lower estuary and along the north coast (Cyr et al., 2015; Le Fouest et al., 2006), and by fluvial input loaded with nutrients (Hudon et al., 2017; Therriault and Lacroix, 1976). Freshwater runoff brings CDOM and SPM, which by modifying light attenuation and upper heating of the water column (Costoya et al., 2016), can affect photosynthesis and primary production of phytoplankton, macroalgae and seagrass

meadows. The area covered by seagrass meadows worldwide tend to decline (Mei et al., 2010), in contrast with the growing meadow of the EGSL. James Bay, located south of Hudson Bay, is the land of Cree communities that relies on natural resources to maintain and transmit their cultural heritage. Their fishing and hunting ground are going through profound changes (*Social and environmental impacts of the James Bay Hydroelectric Project* 1999), notably caused by a decline of the eelgrass (*Zostera marina L.*) beds, a coastal habitat playing a structuring role in the food web. Among factors shaping the growth of eelgrass, photosynthetically available radiation (PAR) is a key limiting factor in eelgrass growth (Duarte, 1991). Since PAR attenuation is largely driven by CDOM and SPM, the retrieval of these constituents can significantly improve our ability to develop mitigation strategies (Murphy et al., 2021) by defining areas more prone for eelgrass implantation and finally to respond to this decline.

The EGSL and the James Bay have been extensively investigated since 2015 by several oceanographic campaigns conducted in the lower St. Lawrence Estuary and in nearshore waters along the north coast of St. Lawrence (Sept-Îles Bay, Manicouagan Peninsula, Forestville) and along the eastern shore of James Bay (Figure 11). These campaigns allowed building an extensive biogeochemical-optical database gathering near-simultaneous remote sensing reflectance (R_{rs}), inherent optical properties (IOPs) and seawater constituents. The main objective of this study is to investigate empirical relationships linking marine reflectance with CDOM absorption and SPM backscattering. We tested various empirical algorithm formulas published in the literature (Dorji and Fearns, 2016; Matthews, 2011) with known potential and drawbacks for their application to modern multispectral sensors. The specific objectives were threefold: 1) to develop empirical algorithms for Landsat-8 and Sentinel-2 satellite missions for the Québec coastal waters; 2) to examine the similarity and/or differences between the coastal zones in terms of optical properties and their implications for satellite remote sensing of CDOM and SPM; 3) to validate the satellite retrievals using OLI and MSI through a matchup analysis. The validation is made with a comparison of six atmospheric correction algorithms.

Table 1: Symbols and acronyms definitions and units

Symbol/Acronym	Definition	Unit
a_g	CDOM (gelbstoff) absorption coefficient	m^{-1}
AOPs	Apparent Optical Properties	
AZMP	Atlantic Zone Monitoring Program	
b_b	Total backscattering coefficient	m^{-1}
b_{bp}	Particulate backscattering coefficient	m^{-1}
b_{bp}^*	Mass-specific particulate backscattering coefficient	m^{-1}
BSI	Bay of Sept-Îles	
C-OPS	Compact Optical Profiling System	
C_{SPM}	Concentration of SPM	mg L^{-1}
CDOM	Chromophoric Dissolved Organic Matter	
E_d	Downwelling plane irradiance	W m^{-2}
EGSL	Estuary and Gulf of Saint-Lawrence	
HOCR	Hyperspectral Ocean Color Radiometer	
IOPs	Inherent Optical Properties	
JB	James Bay	
L_u	Upwelling radiance	$\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2}$
L_w	Water leaving radiance	$\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2}$
PIM	Particulate Inorganic Matter	
POM	Particulate Organic Matter	
R_{rs}	Remote sensing reflectance	sr^{-1}
RSR	Relative Spectral Response	
SPM	Suspended Particulate Matter	

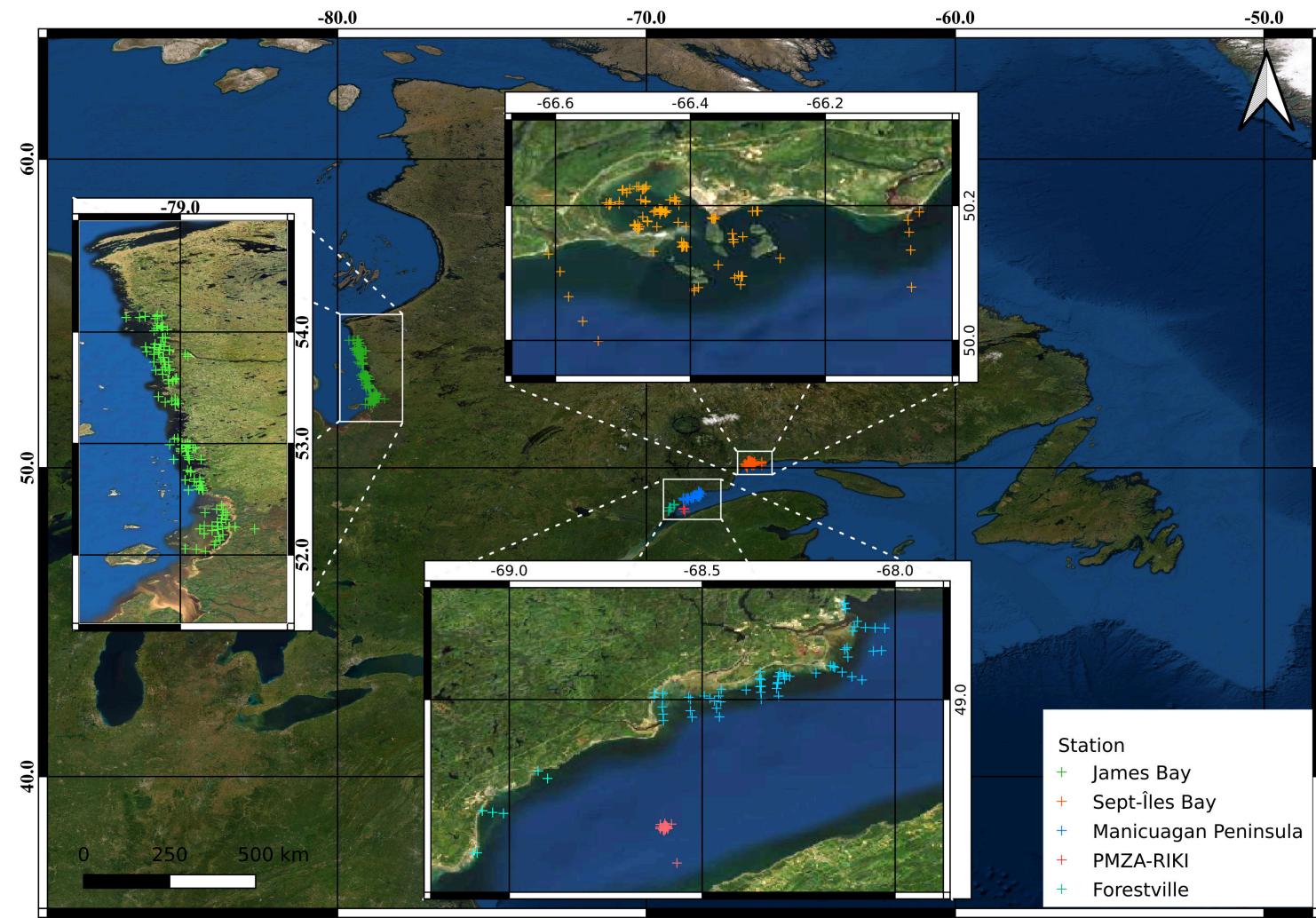


Figure 11: Localization map of the data sets, colours correspond to the different areas in which the data were acquired.

We first present the sampling strategy and materials and methods used to build the optical database. Next we focus on the empirical algorithms development based on *in situ* data, which highlight similarities and differences among coastal regions. The third section will present the validation of satellite retrievals using OLI and MSI sensors in the Bay of Sept-Îles based on a matchup analysis. Finally, the main findings in terms of satellite retrievals of optically significant constituents after the application of atmospheric correction (AC) are discussed.

2.3 Materials and methods

2.3.1 Study area and sampling

Acquisition of *in situ* data has been made within the scope of four different research projects from 2015 to 2019. More detailed information about the projects in the EGSL can be found in Bélanger et al. (2017) and in Araújo and Bélanger (in revision). Briefly, the lower St. Lawrence Estuary was sampled within the framework of the Atlantic Zone Monitoring Program (AZMP or PMZA) of the Department of Fisheries and Oceans Canada. The station named PMZA-RIKI (Figure 11, red symbols), in front of Rimouski, has been visited on 19 occasions in 2015 as detailed in Bélanger et al. (2017). In-water radiometric measurements were performed for the determination of Apparent Optical Properties (AOPs). An optical package was also deployed for the determination of bulk IOPs, including particle backscattering coefficient (b_{bp}). A suite of biogeochemical and optical variables was obtained from discrete water samples, including SPM, spectral CDOM and particle absorption coefficients (a_g and a_p).

Within the scope of the Canadian Healthy Oceans Network (CHONe) funded by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC), 11 field campaigns were conducted in the Bay of Sept-Îles (BSI) area from August 2016 to June 2019 (Fig 11; orange symbols) (Araújo and Bélanger, in revision). The sampling includes mainly nearshore

Table 2: Number of concomitant measurement of R_{rs} with C_{SPM} and IOPs (a_g , b_b) in the EGSL and James Bay

R_{rs} with	EGSL	James Bay
C_{SPM}	186	161
a_g	188	155
b_b	132	144

coastal waters and a few optically shallow waters (~ 120 stations). In September 2017, with the collaboration of the DFO and the Canadian Hydrographic Service (CHS), fieldwork in support of airborne hyperspectral imagery acquisition was carried along the northern shore of the EGSL, including the Forestville (FV) area sampled on September 11 where 7 stations with complete optical and biogeochemical data set were visited (Fig 11; turquoise symbols). Finally, in August 2019, an intensive field campaign was organized in the frame of the WaterSat Imaging Spectrometer Experiment in nearshore coastal waters of the Manicouagan peninsula (Fig. 11; blue symbols). More than 50 stations were visited using two boats. For all these EGSL projects, the protocols detailed in Bélanger et al., 2017 were followed for AOPs, *in situ* IOPs and biogeochemical and optical measurements (see below). The nearshore coastal waters of eastern James Bay were sampled within the framework of a multidisciplinary project in collaboration with the Cree nation to better understand the evolution of eelgrass meadows over the last three decades (Fig 11; green symbols). The sampling was performed in August-September 2018 and July-August 2019 on board the freighter canoes piloted by members of the Cree communities. Due to logistic constraints, different protocols were adopted for in-water AOPs and IOPs (see below). The number of concomitant measurements of R_{rs} with C_{SPM} and IOPs (a_g , b_b) in the EGSL and in James Bay are shown in Table 2.

2.3.2 Derivation of R_{rs}

Derivation of R_{rs} follows NASA protocol (Mueller et al., 2003) as equation 2.1. Underwater measurement of upwelling radiance, $L_u(z)$ and above water measurement of downwelling irradiance, $E_d(0^+)$, were made with different instruments and methods in the EGSL and JB. In the EGSL, vertical profiles of upwelling radiance, $L_u(\lambda, z)$, was measured at 19 wavelengths with different Compact-Optical Profiling System instruments (Morrow et al., 2010). 17 common wavelengths were available for the various C-OPS instruments used in the EGSL: 320, 340, 380, 412, 443, 465, 490, 510, 532, 550 (or 560), 589, 625, 665, 683, 694, 710 and 780 nm. In James Bay, underwater hyperspectral upwelling radiance ($L_u(z)$) below the sea surface (5 to 15 cm depth) was measured using two Satlantic HyperOCR radiometers (HOCR) held away from the boat with a pole and submerged at two different depths, allowing an estimation of the spectral diffuse attenuation coefficient for the upwelling radiance (K_{L_u}). The acquisition spectrum of the HOCR spans from 380 to 800 nm by a 3 nm step. In all cases, incident $E_d(0^+)$ was measured above water using a radiometer attached to the boat above the structure to avoid shadow. All radiometers were calibrated by the manufacturer less than a year before or after the deployment. In-water radiometry data was processed using the open-source R-packages Cops and HyperocR available on the GitHub platform (<https://github.com/belasi01/>). A detailed discussion about the C-OPS instrument and the processing protocols can be found elsewhere (Antoine et al., 2013; Bélanger et al., 2017; Hooker, Morrow, et al., 2013; Morrow et al., 2010; Mueller et al., 2003). The processing includes the extrapolation of $L_u(z)$ to the sea surface using estimated value for K_{L_u} and its transmission across the air-water interface to provide $L_w(0^+)$, which is used to estimate the remote sensing reflectance:

$$R_{rs} = \frac{L_w(0^+)}{E_d(0^+)} \quad (2.1)$$

Instruments self-shadow correction was applied to C-OPS data following the procedure

described by Gordon and Ding (1992) and Zibordi and Ferrari (1995), but considered negligible for HOCLR (radius of 3 cm). Radiometric variables were measured with different spectrum limits and were interpolated to obtain values at the same wavelengths through the database. The spectral interpolation (generally a few nanometers) error is assumed to be negligible. We also compute R_{rs} from our in-water radiometric measurement for OLI and MSI sensor bands through the RSR function to develop empirical algorithms specifically for those sensors and to conduct the matchup analysis.

2.3.3 Particulate backscattering

The volume scattering function (VSF) in the backward direction of light propagation was measured with four different backscattering meters: an Hydroscat-6 from HObiLabs, and ECO-VSF, BB3 and BB9 from Wetlabs. The Hydroscat-6 was used during PMZA-RIKI, FV, CHONe and WISE-Man sampling. It measures the VSF at 141° at six waves bands centered at 394, 420, 470, 532, 620 and 700 nm. The BB9 was used at a few stations during WISE-Man (wavebands: 412, 440, 488, 510, 532, 595, 650, 676 and 715 nm). In James Bay the ECO-VSF (wavebands: 470 and 532 nm) and BB3 (wavebands: 470, 532 and 715 nm) were used in 2018 and 2019, respectively. The Hydroscat-6, mounted on an optical package, which also included a CTD (conductivity-temperature-depth; SBE19 from Seabird scientific) and an a-sphere (Hobilabs) to measure total non-water absorption coefficient, for vertical profiles of IOPs along the water column. After depth discretization, the data point closest to the surface is selected. Similarly, the BB9 was deployed together with a CTD and an AC-s meter. In James Bay, the BB3 and the ECO-VSF were held by hand in surface water for 2 minutes, and the average value was retained. The raw VSF data, measured at given scattering angle (i.e., 124° for the ECO-BB and 141° for Hydroscat-6), were converted in physical unit ($\text{m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$) using the manufacturer calibration coefficients with updated dark offsets taken on the field. The conversion of the VSF into a backscattering coefficient (b_b) was performed following the procedure described in Doxaran, Leymarie, et al. (2016) for ECO-BB and Hydroscat-6 and

in Boss et al. (2004) for the ECO-VSF. The corrections included the loss of signal due to the absorption of the backscattered photons along the optical path length, which was estimated using absorption coefficients for the a-sphere or the AC-s when available, or from absorption coefficients of CDOM and particles determined on discrete samples. On a few occasions in James Bay, the ECO-BB meters saturated in very turbid waters and the data was flagged.

2.3.4 Discrete water sample measurements

Water samples were taken near the surface with a bucket or a Niskin bottle, stored away from light and heat in coolers. They were processed in the laboratory as soon (less than 8 hours after collection) as the boat returned to harbour. To trace CDOM concentration, spectral absorption coefficients, a_g , were made according to IOCCG (2018) protocol. Briefly, two filtration steps allow removing all particulate matter, a prefiltration on Whatman GF/F (0.4 μm nominal particle size retained) followed by filtration on Nucleopore 0.2 μm nominal pore size. The absorbance was obtained using a Perkin Elmer double-beam Lambda-850 with quartz cells on 10 cm, 5 cm or 1 cm path lengths (depending on the concentration) against nano pure water as the reference. The raw data were converted to absorption, and corrected for null offset in the NIR with an open source packages on R, RspectroAbs and cdom available on GitHub (<https://github.com/belasi01/RspectroAbs>; <https://github.com/PMassicotte/cdom>).

Concentration of SPM (C_{SPM}) were determined following the recommendations of Neukermans, Ruddick, et al. (2012). Whatman GF/F filters of 47mm diameter which effectively retained particles larger than about 0.7 μm , were rinsed with distilled water, dried and weighted with a high precision microbalance. Each water sample (volumes depended on turbidity evaluated using the Secchi depth) was filtered in triplicates to assess variation of the measured C_{SPM} . The mean coefficient of variation for the EGSL data is 11.70%. Additionally, the loss on ignition technique was used by placing the filters at 450°C for four hours to determine the fraction of inorganic matter (PIM) and organic matter (POM) in the total SPM pool.

2.3.5 Algorithm development and performance metrics

For the remote sensing algorithm development, the dataset is divided at approximately 70% and 30%, respectively, into training and testing datasets. All regressions were made using the training set, while the performance metrics were calculated on the testing set. Following the recommendations of Seegers et al. (2018), we used three metrics to measure individual algorithms performance and compare them. As outliers may be present (e.g., unflagged optically shallow waters) in our dataset, we choose to compare the accuracy metrics of the absolute error (AE) computed with the mean and the median. The former is sensitive to outliers while the latter is not. Bias is measured with the median of the error, masking the impact of the outliers, giving the algorithm systematic error from the bulk of the observation.

To assess the relative efficiency of atmospheric correction algorithms, we have used a pairwise comparison metric. Briefly, this method allows selecting the algorithm with the least residuals ($\hat{y} - y$) for each observation. Then, the number of times an algorithm is chosen instead of its competitors is used to compute the percent *wins*. To facilitate comparison with the latest literature on satellite remote sensing performance Pahlevan, Mangin, et al., 2021, we chose to report the Median Symetric Accuracy (MdSA) and the Symetric Signed Percentage Bias (SSPB).

2.3.6 Matchup exercice and atmospheric correction comparison

The regional algorithms were applied to satellite imagery from Sentinel-2 and Landsat-8 for which coincident *in situ* data were available. In total, 72 *in situ* matchups where found at an interval of +- 3 hours, 62 with MSI and 10 with OLI. The matchup data points constitute the testing data sets. L1C images of Landsat-8 OLI and Sentinel-2 MSI A and B, corresponding to a day of an textitin situ acquisition, were downloaded. We applied six atmospheric correction algorithms: (1) the case 2 regional coast color (C2RCC) and (2) the case 2 extreme (C2X) (Brockmann et al., 2016), (3) the atmospheric correction for OLI lite (ACOLITE) using the dark spectrum fitting algorithm option (Vanhellemont, 2019a; Van-

hellemont, 2019b; Vanhellemont, 2020; Vanhellemont and Ruddick, 2018; Vanhellemont and Ruddick, 2021), (4) Sea-viewing Wide Field-of-View Sensor (SeaWiFS) Data Analysis System (SeaDAS)(Franz et al., 2015; Pahlevan, Sarkar, et al., 2017), (5) the spectral shape parameter (SSP) implementd in SeaDAS (Singh et al., 2019), and (6) the image correction for atmospheric effect (iCOR) (Keukelaere et al., 2018). C2RCC and C2X are artificial neural-network based models trained with a synthetic dataset generated from radiative transfert simulations of various oceanic and atmospheric conditions. The difference between C2RCC and C2X is that the later is trained with more extreme cases of optically complex waters. The others algorithms belong to the tow-steps family. First they remove the effect of Rayleigh scattering and gaseous absorption using pre-computed look-up-tables (LUTs). Second they estimate the aerosol contribution to the Rayleigh-corrected reflectance. The algorithms are based on different assumptions. For example SeaDAS is based on the black pixel assumption in the near infrared (NIR) and use it as a baseline to extrapolate the contribution of aerosol in the rest of the spectrum. The black pixel assumption in the NIR does not hold true in water where SPM backscatter a significant amount of light at those wavelengths. The SSP algorithm is an addendum to the SeaDAS processor to estimate aerosol contribution with the assumption of a non-zero water-leaving radiance in the UV and in the NIR. ACOLITE and iCOR models are image-based algorithm originally designed to retrieve aerosol optical thickness (AOT) over land surfaces, but with additional correction for water (sky glint corrections). They were adapted to retrieved AOT from the darkest pixels found in a sub-scene (e.g. dense dark vegetation or clear waters). These algorithms have been chosen because they are specifically designed to perform atmospheric correction in coastal waters and freely available online. After image processing, 44 matchups out of 72 were valid, from which 36 were in the BSI and 8 in JB. Following the methodology described in Pahlevan, Mangin, et al. (2021), the median pixel value was extracted from a $150m^2$ box surrounding the measurement location.

2.4 Results

2.4.1 Exploratory Data Analysis

The density distributions on log10 space of *in situ* R_{rs} in the EGSL and JB (Figure 12) shows that data at all wavelengths are skewed toward lower intensities. We observed different distributions between the EGSL and in JB, notably at 665 nm, where JB shows higher R_{rs} with more variability, while the EGSL reflectance is more skewed towards lower intensities. Similar R_{rs} are observed in the green, but again larger variability are found in JB. In contrast, low R_{rs} values ($<0.0025\text{ sr}^{-1}$) were observed in the blue for both regions, but with higher variability in the EGSL. All wavelengths follow different bimodal distributions with the major mode in lower R_{rs} intensities (except for 665 nm in the EGSL).

The histograms of SPM and CDOM (Figure 13), also show different distributions in the EGSL and JB. C_{SPM} follows a log-normal distribution in the EGSL, while in JB, the distribution is negatively skewed, and presents a higher range of concentrations.

CDOM concentration, as expressed by the $a_g(440)$ proxy, exhibits a bimodal distribution in both regions, which is more obvious in JB. In addition, a higher CDOM background is present in JB with most values between 1 and 3 m^{-1} , but with frequent values $>3\text{ m}^{-1}$.

Figure 14 shows the relationships between R_{rs} at four wavelengths with C_{SPM} , $b_{bp}(532)$ and $a_g(440)$. The relationship between C_{SPM} and R_{rs} is almost null at 440 nm and becomes positively stronger at longer wavelengths. At 560 nm, the relation is strongly dependent on CDOM concentration (color of the dots), meaning that for a given remote sensing reflectance, high C_{SPM} are associated with higher CDOM concentration. In JB, for example, for an R_{rs} value of 0.004 sr^{-1} , we found $a_g(440)$ and C_{SPM} values of 1 m^{-1} and 2 mgL^{-1} , respectively, then 4 m^{-1} and 11 mgL^{-1} , and finally 8 m^{-1} and 42 mgL^{-1} . If we plot a linear relationship between C_{SPM} and R_{rs} , in JB alone, we find that as CDOM increases the intercept of the relationship also increases. In the same way, but with different relationships, the EGSL

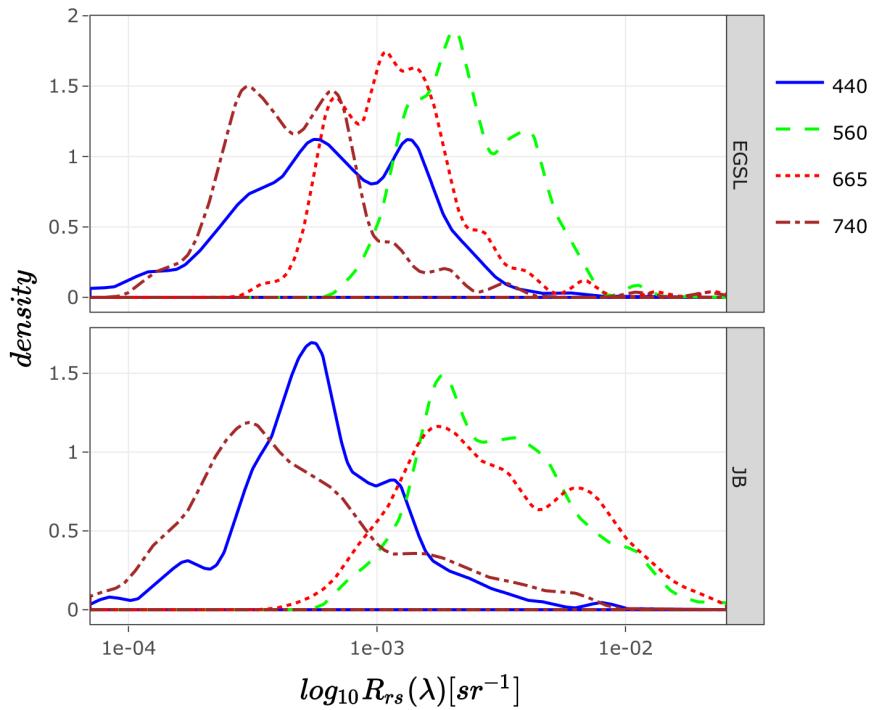


Figure 12: Kernel density function showing the distribution of spectral reflectance. Continuous, dashed, dot and dot-dashed lines represent R_{rs} at 440, 560, 665, 740 nanometers, respectively.

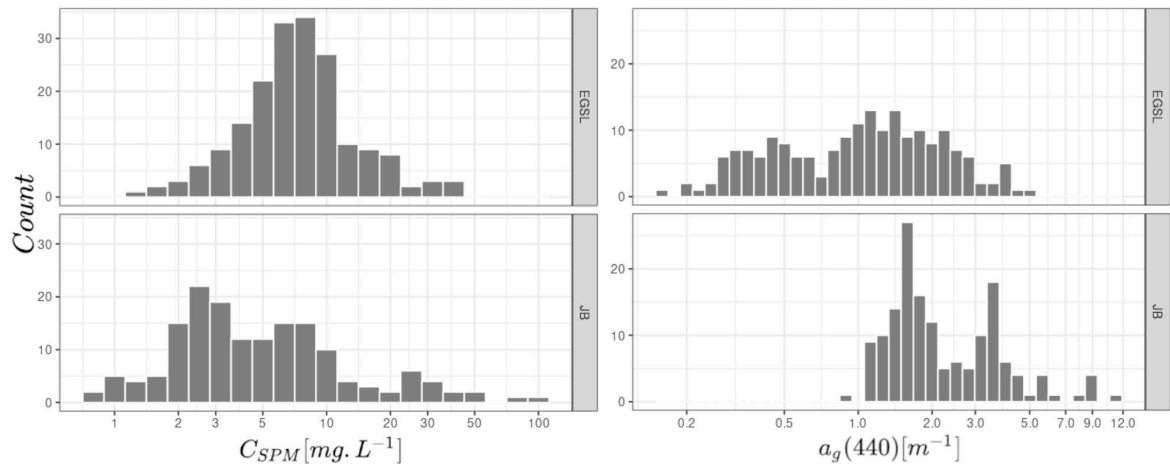


Figure 13: Histograms showing the distribution of C_{SPM} and $a_g(400)$ in the EGSL and JB

R_{rs} versus C_{SPM} and CDOM seem to be linked. As CDOM concentration increases, $R_{rs}(560)$ decreases even if C_{SPM} increases. These results indicate a significant role of CDOM for the green reflectance in both coastal zones.

C_{SPM} versus R_{rs} in the red (665 nm) also revealed regional differences between the EGSL and JB. For a C_{SPM} of 10 mgL⁻¹, R_{rs} is ten times higher in JB than in EGSL. It also shows that the strength of the correlation is weaker in the EGSL comparatively to JB, with a Spearman correlation coefficient of 0.33 and 0.79, respectively. The strongest relationship between R_{rs} with C_{SPM} in the two regions is found in the near infrared (740 nm), a spectral region where CDOM is known to have negligible influence on R_{rs} . The linear relationship for both regions converge (similar slope and intercepts) and higher coefficients of correlation of 0.37 and 0.80 for EGSL and JB, respectively, are reached. Interestingly, at 800 nm (not shown), the two distinct groups, visible at 665 nm, appear again, but the Spearman correlation coefficient (r) reaches its highest values of 0.46 and 0.81 for the EGSL and JB, respectively.

Knowing that remote sensing reflectance is proportional to particulate backscattering coefficient, an inherent optical property (IOP), we further examine the relationship between R_{rs} and b_{bp} measured in the green at 532 nm. Figure 14B indicates that the particles sampled in the EGSL and JB likely have distinct specific optical properties. First, the strongest relationship between $b_{bp}(532)$ and R_{rs} was found in the red band (665 nm) with no difference between JB and the EGSL. Second, a regional distinction is found at 740 nm, where a linear relationship would yield different intercept, but similar slope. Lower $b_{bp}(532)$ values for identical $R_{rs}(740)$ is found in the EGSL compared to JB, indicating that the spectral slope of b_{bp} or particulate absorption coefficients (a_p) in the NIR are not the same in both regions. Hence, it confirms the regional differences previously observed from the C_{SPM} versus R_{rs} relationships. The relationships between absorption of CDOM at 440 nm and R_{rs} at the same four wavelengths are shown in Figure 14C. Absorption spectrum of CDOM shows an exponential decay toward longer wavelengths. As expected, knowing the inverse relationship between R_{rs} and absorption, stronger negative correlation is found at 440 nm than at 560 nm. However,

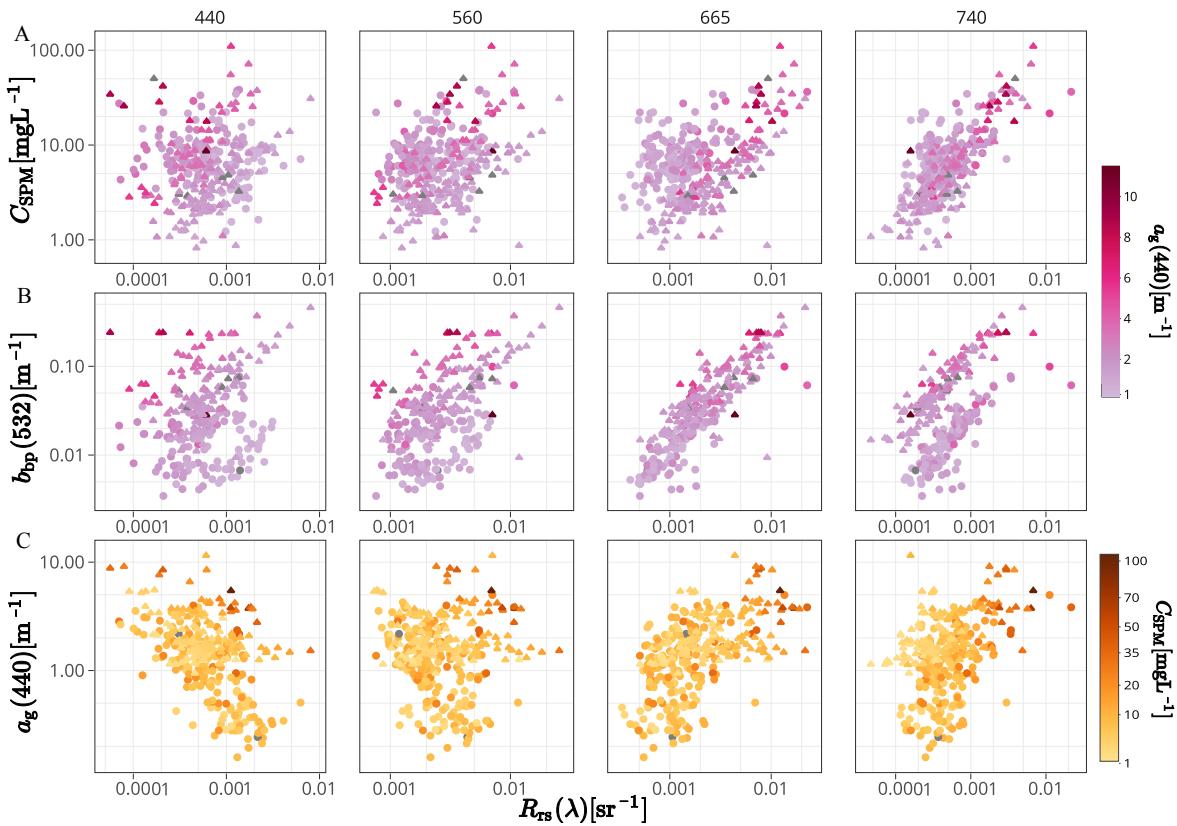


Figure 14: Relation between R_{rs} at 440, 560, 665, 740 nanometer and (A) C_{SPM} , (B) $b_{bp}(532)$, (C) $a_g(440)$. Plots (A) and (B) colours correspond to $a_g(440)$ to assess covariance patterns. Similarly, plots (C) colours correspond to C_{SPM} in square root space.

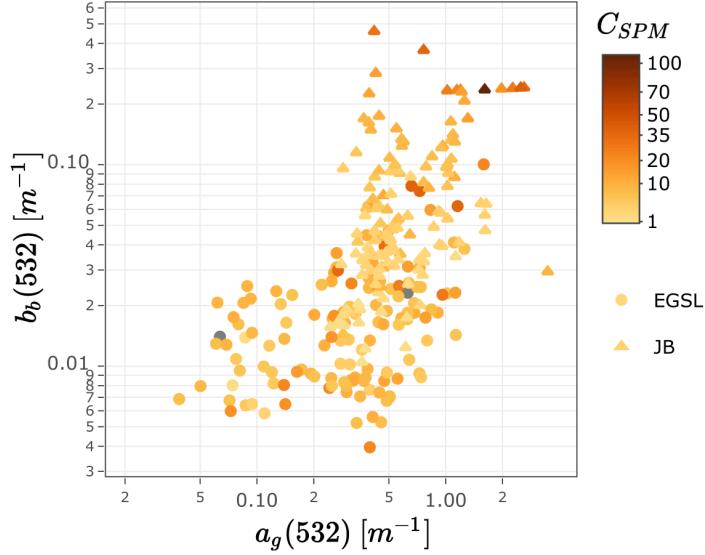


Figure 15: Relation between $b_b(532)$ and $a_g(532)$, the colour corresponds to C_{SPM} in square root space

and as previously stated for C_{SPM} , the trend of the $a_g(440)$ relation with R_{rs} is impacted by C_{SPM} through the b_{bp} , but this time with higher R_{rs} value for high CDOM and C_{SPM} events. As we move toward longer wavelengths, at 665 and 740 nm, the relation of $a_g(440)$ and R_{rs} become positive, meaning a potential co-variation between CDOM and particle backscattering and/or SPM, or a direct contribution of CDOM to particle backscattering. However, even at 740 nm, CDOM is suspected to have a significant absorption power. Indeed, the C_{SPM} concentration follows a diagonal gradient from top left to bottom right; it shows the interaction of a_g and SPM on $R_{rs}(740)$, with lower R_{rs} associated with high $a_g(440)$ and low C_{SPM} values. Contrary to the C_{SPM} versus R_{rs} relationship, we found no difference in $a_g(440)$ with R_{rs} relation between the EGSL and JB. This indicates that a single algorithm can be fitted to retrieve $a_g(440)$ from marine reflectance.

The relation of $a_g(532)$ with $b_b(532)$ and C_{SPM} as colour (Figure 15) shows a significant positive relationship between these three parameters. In JB, $a_g(532)$ almost does not go below 0.20 m^{-1} , while in the EGSL it goes down to 0.038 m^{-1} . Hence, CDOM at this

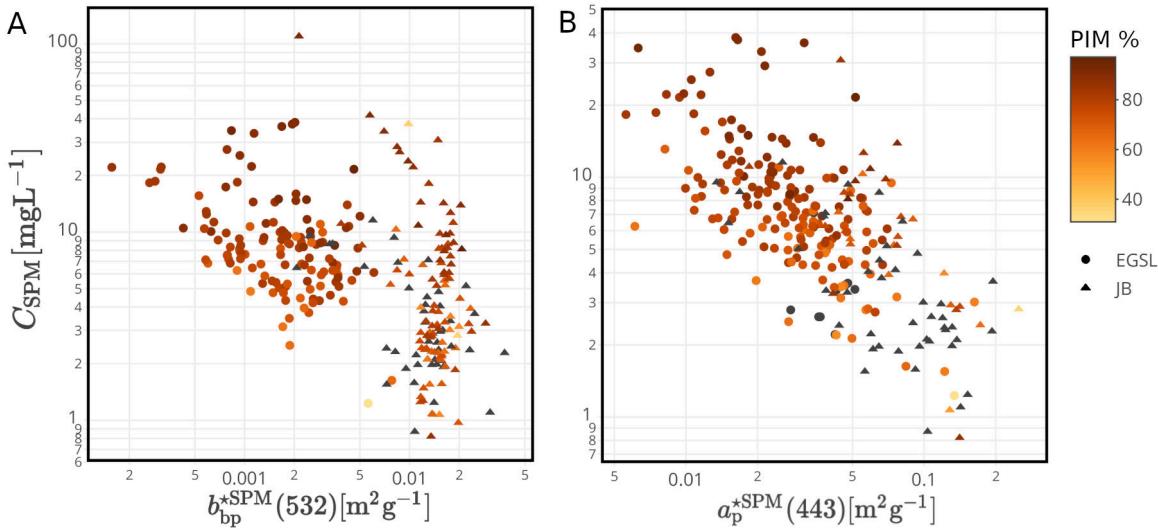


Figure 16: (A) Mass specific particulate backscattering at 532 nm versus C_{SPM} , (B) Mass specific absorption at 443 nm versus C_{SPM} . Color corresponds to PIM fraction of total C_{SPM} , in percent. Black points corresponds to absence of PIM data.

wavelength absorb more in JB than in the EGSL. In fact the mean value of $a_g(532)$ is of 0.054 and 0.028 m^{-1} in JB and the EGSL, respectively. Furthermore, as noted by the colour, C_{SPM} follows the y-axis of $b_b(532)$ directly in JB. As b_b increases, so does C_{SPM} , showing a weak relation between $b_b(532)$ and $a_g(532)$. In fact, for those variables the spearman corelation coefficient is 0.37 and 0.47 in the EGSL and in JB respectively. The mass-specific particulate backscattering ($b_{bp}^{*SPM} = b_{bp}/C_{SPM}$, in m^2g^{-1}), is a physical quantity used to study the backscattering efficiency of SPM (e.g., Neukermans, Loisel, Mériaux, Astoreca, and Mc-Kee, 2012). On average, $b_{bp}^{*SPM}(532)$ of 0.0140 and $0.0021\text{ m}^2\text{g}^{-1}$ was found in JB and the EGSL (table 3), respectively, indicating that particles are six times more efficient at scattering light in JB compared to those in EGSL. More specifically, we found a negative relationship between C_{SPM} and $b_{bp}^{*SPM}(532)$ (Figure 16A) in the EGSL, but not in JB. As a result, in the EGSL, as C_{SPM} increase b_{bp} will stay approximately the same and b_{bp}^{*SPM} decrease. In JB, in contrast, the slightly positive relationship of C_{SPM} versus b_{bp}^{*SPM} , yield a stronger positive correlation between C_{SPM} and b_{bp} and indicate an exponential effect of C_{SPM} on b_{bp} .

Table 3: Regional mean mass-specific particulate absorption and backscattering (in m^2g^{-1}) at 532 nm of C_{SPM} .

Region	$b_{\text{bp}}^{*\text{SPM}}$	$b_{\text{bp}}^{*\text{PIM}}$	$a_p^{*\text{SPM}}$
EGSL	0.0021	0.0028	0.033
JB	0.0140	0.0170	0.083

Regarding the mass specific particulate absorption at 443 nm, a difference of magnitude is found between the JB and the EGSL, but a similar negative relationship was found between a_p^* and C_{SPM} in both regions (Figure 16B).

2.4.2 Empirical algorithms development

2.4.2.1 CDOM retrieval

Normalization functions such as band ratio algorithms show great potential to assess $a_g(\lambda)$ accurately. In lower wavelengths, a_g is the main OAC responsible for the total absorption in the EGSL (e.g., Araújo and Bélanger, in revision) and in JB. Thus its variability can be directly related to the ratio of a wavelength sensitive to its absorption spectrum to a wavelength insensitive to it (Gitelson et al., 1993). Furthermore, band ratio algorithms are less sensitive to atmospheric correction errors (see section 2.4.3.2), as the ratio will diminish a part of the error. Building up on published studies and the exploratory analysis above, we tested relationships between a_g and R_{rs} ratio using non-linear algorithms with the non-linear least square (*nls*, Gauss-Newton algorithm) function of R. Only the best relationships are shown in Figure 17 and Table 4.

For comparison, we tested the recently published so-called end-members approach of Houskeeper et al., 2021 with an algorithm based on the $R_{\text{rs}}(665)$ to $R_{\text{rs}}(440)$ ratio (Figure 17). This algorithms shows a curvature starting at around $a_g(440)$ values of 2m^{-1} . An algorithm

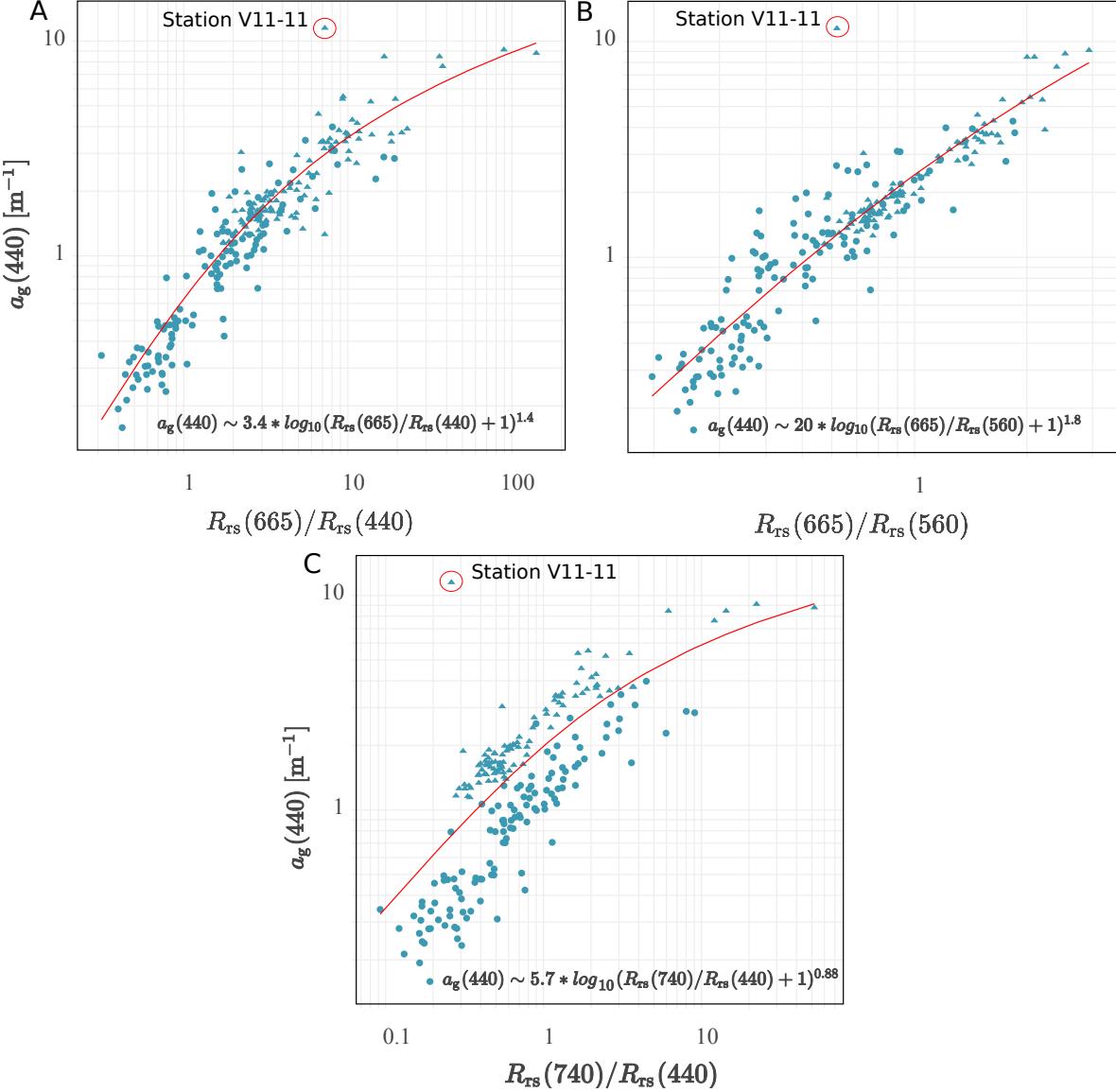


Figure 17: Non-linear algorithms for $a_g(440)$ on log-log space by (A) band ratio $R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$, (B) band ratio $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$, (C) band ratio $R_{rs}(740)/R_{rs}(440)$. Continuous line corresponds to fitted values. Circles and triangles correspond to data acquired in the EGSL and in JB respectively. Station V11-11 in JB is flagged as optically shallow, the Secchi disk touch the bottom at 1.30 m.

Table 4: Algorithms to retrieve $a_g(440)$, $a_g(295)$ and $a_g(275)$, with associated performance metrics.

Parameter	Equation	Mean AE	Median AE	Bias
		[m ⁻¹]	[m ⁻¹]	[m ⁻¹]
$a_g(440)$	$20\log_{10}(R_{rs}(665)/R_{rs}(560) + 1)^{1.8}$	0.34	0.23	0.04
	$3.4\log_{10}(R_{rs}(665)/R_{rs}(440) + 1)^{1.4}$	0.44	0.28	0.09
	$5.7(R_{rs}(740)/R_{rs}(440))^{0.88}$	0.75	0.62	0.06
$a_g(295)$	$174\log_{10}(R_{rs}(665)/R_{rs}(560) + 1)^{1.7}$	3.49	2.28	0.02
$a_g(275)$	$219\log_{10}(R_{rs}(665)/R_{rs}(560) + 1)^{1.6}$	4.76	3.42	0.15

based on $R_{rs}(740)$ to $R_{rs}(440)$ ratio, the end-members of the MSI bands was also tested (Figure 17C). It shows a regional separation likely due to the use of reflectance at 740 nm, and did not prove to have a better accuracy even when fitting the model for the EGSL and JB independently (result not shown). In addition, $R_{rs}(740)$ estimated from COPS (in the EGSL) is obtained using linear interpolation between 710 and 765 nm, while in JB it is measured using the HOCR.

In the EGSL and JB, respectively, 18% and 45% of the stations had values of $a_g(440) > 2\text{m}^{-1}$, showing the necessity of an algorithm able to work in CDOM laden coastal waters. We found that the ratio of $R_{rs}(665)$ to $R_{rs}(560)$ gives results similar to the $R_{rs}(665)$ to $R_{rs}(440)$ ratio in terms of performance metrics, but with a slight curvature that is much less affected by this "saturation" at very high CDOM concentration. In terms of Mean and the Median absolute errors, $R_{rs}(665)$ to $R_{rs}(560)$ ratio yield values of 0.34 and 0.23 m^{-1} , respectively, for a range of $a_g(440)$ values spanning from 0.16 to 11.5 m^{-1} , which is slightly better than for the $R_{rs}(665)$ to $R_{rs}(440)$ ratio. We fitted this algorithm to retrieve CDOM in the UV-B domain, i.e. $a_g(295)$ and $a_g(275)$, which can be used to predict dissolved organic carbon (DOC) concentration in

coastal waters (Fichot and Benner, 2011; Fichot and Benner, 2012).

2.4.2.2 SPM retrieval

Several empirical or semi-empirical algorithm formulas have been proposed to retrieve C_{SPM} from multispectral space-borne sensors in the literature (e.g, see the review of Dorji and Fearns, 2016, and ref. therein; Tavora et al., 2020). In this study, we found that the best algorithm for C_{SPM} used a single reflectance at 665 [nm] (Figure 18), as reported in many studies (e.g., Nechad et al. (2010) as shown in Figures 18A and B). This single band algorithm has good precision and accuracy in JB, with a bias of 0.20 mgL^{-1} and a Median AE of 0.88 mgL^{-1} . An outlier was found in optically shallow water, where the station depth was 0.56 m, which strongly influenced the Mean AE, degrading the algorithm's overall performance. For the EGSL, we tested the algorithm published by Mohammadpour, Montes-Hugo, et al. (2015) based on the $R_{\text{rs}}(710)/R_{\text{rs}}(665)$ ratio. It yield a slight degradation of the precision and accuracy metrics compared to those obtained using the single-band red algorithm with a Median AE of 1.97 mgL^{-1} and a bias of 1.02 mgL^{-1} .

Residuals of the C_{SPM} algorithm based on $R_{\text{rs}}(665)$ show a positive correlation with $a_g(440)$ (Figure 19). The slope is of 1.1 and 2.4 for the EGSL and JB, with p values significant for JB ($p < 0.001$) but not for the EGSL ($p = 0.023$). Others band formulations (not presented here) have been tested with no better success.

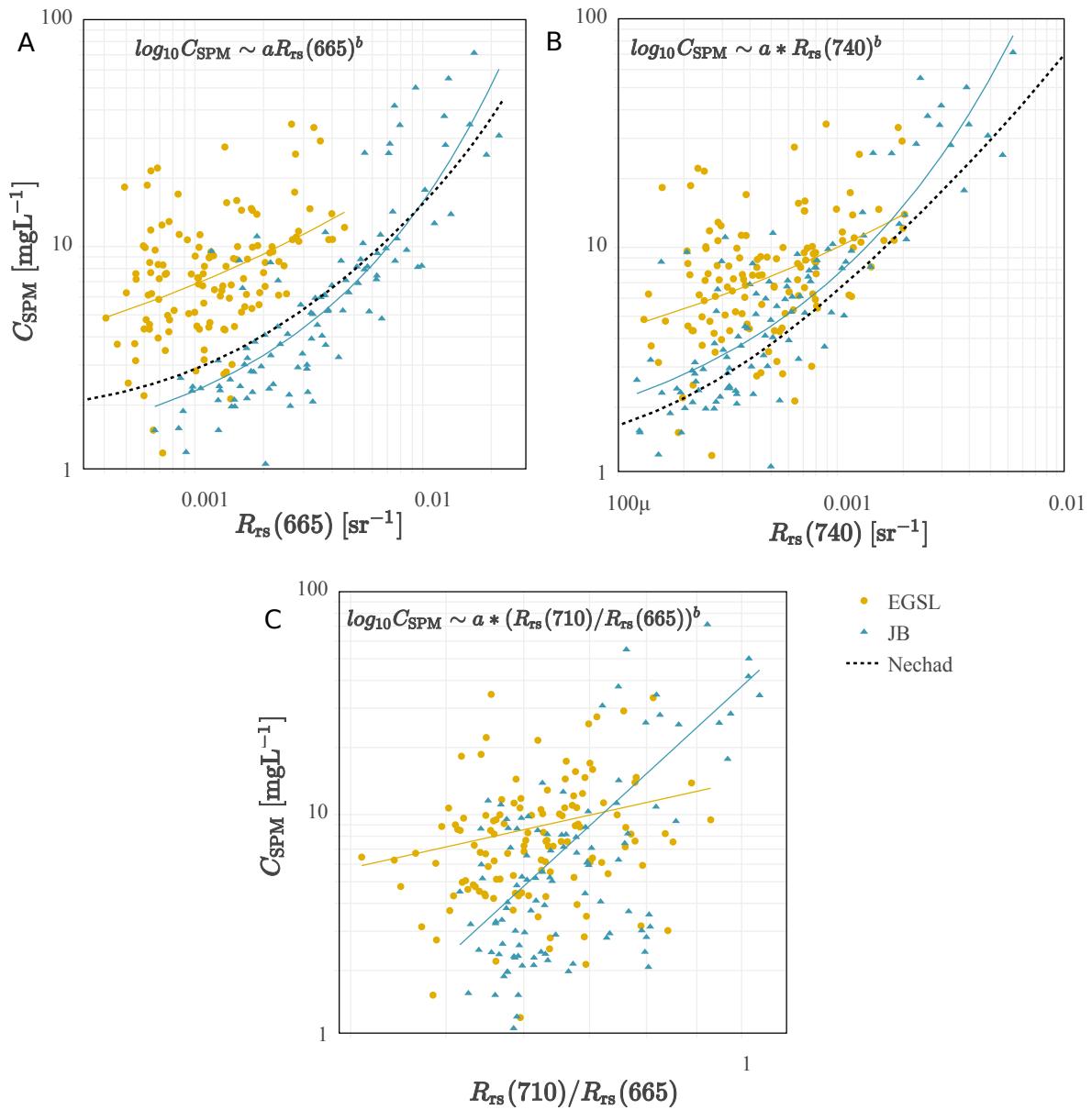
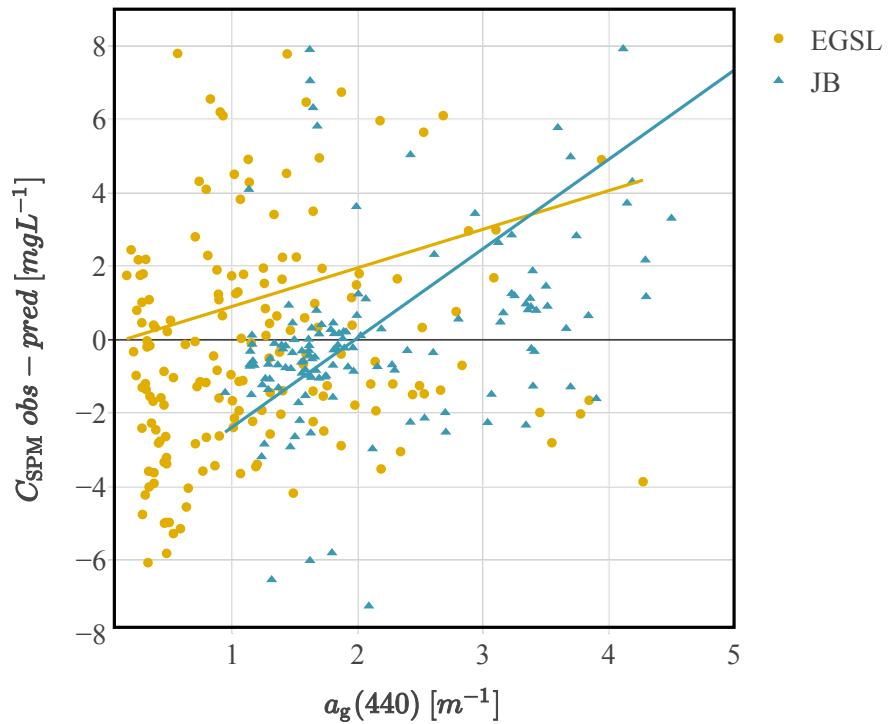


Figure 18: Regional algorithms for C_{SPM} (A) from $R_{\text{rs}}(665)$ (B) from $R_{\text{rs}}(740)$, and (C) from $R_{\text{rs}}(710)/R_{\text{rs}}(665)$ ratio. Dashed line correspond to C_{SPM} values fitted with Nechad et al. (2010) algorithm.

Table 5: Regional algorithms for C_{SPM} with their associated performance metrics.

Parameter	Region	Equation	Mean AE	Median AE	Bias
			[mgL ⁻¹]	[mgL ⁻¹]	[mgL ⁻¹]
$\log_{10}C_{\text{SPM}}$	EGSL	$17(R_{\text{rs}}(710)/R_{\text{rs}}(665))^{1.5}$	3.75	1.97	1.02
	JB	$33(R_{\text{rs}}(710)/R_{\text{rs}}(665))^{4.9}$	6.23	1.96	1.15
	EGSL	$3.6R_{\text{rs}}(665)^{0.21}$	3.42	1.79	0.52
	JB	$13R_{\text{rs}}(665)^{0.52}$	3.47	0.82	0.30
	EGSL	$3.8R_{\text{rs}}(740)^{0.19}$	3.34	1.82	0.65
	JB	$17R_{\text{rs}}(740)^{0.42}$	1.86	0.88	0.20

Figure 19: C_{SPM} vs $R_{\text{rs}}(665)$ algorithm residuals as a function of $a_g(440)$. Yellow dot represents data from the EGSL and blue triangle data from JB. Yellow and blue lines represents the fitted relationships for the EGSL and JB respectively.

2.4.3 Validation with matching satellite imagery

The above algorithms were applied to actual satellite imagery from OLI and MSI after the application of atmospheric corrections (AC), which is a crucial pre-processing step for any aquatic applications. Therefore, we performed a matchup analysis for the entire database with MSI and OLI sensors. As mentioned in the methods, we tested six atmospheric correction algorithms: (1) C2RCC, (2) C2X, (3) ACOLITE, (4) SeaDAS, (5) SSP, (6) iCOR. Primarily, we will assess the performance of AC based on retrieved R_{rs} . The sensitivity of the $a_g(440)$ and C_{SPM} retrievals to error in R_{rs} retrieval introduced by the AC algorithm is then presented. For C_{SPM} the single-band algorithm based on 665 nm available on both MSI and OLI was chosen. Note that, we parametrized the algorithms presented above by computing the coefficients for the specific satellite sensor bands of OLI and MSI, but also for other commonly used satellite sensors for coastal water monitoring (MODIS, MERIS and OLCI). Those bands were retrieved from *in situ* R_{rs} through the Relative Spectral Response (RSR) function of each sensor as provided by the space agencies. The regional empirical coefficients can be found in Table 9 in the supplementary material (Annex 2.7).

2.4.3.1 R_{rs} matchups

Figure 20 show the *in situ* versus remotely retrieved R_{rs} by the OLI and the MSI for each atmospheric correction algorithm. In general, the algorithms tend to overestimate R_{rs} , except for C2RCC and C2X. In the same way, all algorithms except C2RCC and C2X overestimated R_{rs} at 443 and 740 nm, two wavelength where *in situ* R_{rs} is at the lowest. For example, at 443 nm ACOLITE and iCOR give a SSPB of respectively 858.02% and 993.08%, indicating systematic overestimation. The green band is the most accurately retrieved by all algorithm, where R_{rs} is the highest. No single algorithm is found to give the best results for all wavelengths and sensors. At 443, 560, 665, 704, 740 nm C2RCC get the more percent wins followed by C2X. C2RCC and C2X gives respectively a MdSA of 68.28% and 60.83 for

the MSI green band (560 nm). Interestingly, SeaDAS give the best results for the OLI green band (561 nm) with a MdSA of 26.12%, closely followed by SSP with a MdSA of 34.10%. In contrast for the MSI green band (560 nm), SeaDAS and SSP gives respectively MdSA of 217.33% and 205.27%, while C2RCC and C2X give respectively a MdSA of 39.66% and 47.17% for the OLI green band. Likewise, C2RCC and C2X give the lowest MdSA for the MSI red band (665 nm) with respectively 57.08% and 77.83%, while they give high MdSA for the OLI red band (655 nm) with 101.78% and 211.28%, respectively. Again inversely, SeaDAS and SSP give the lowest MdSA for the OLI red band with respectively 37.39% and 48.77%, while they give high MdSA for the MSI red band with 179.86% and 104.43%, respectively.

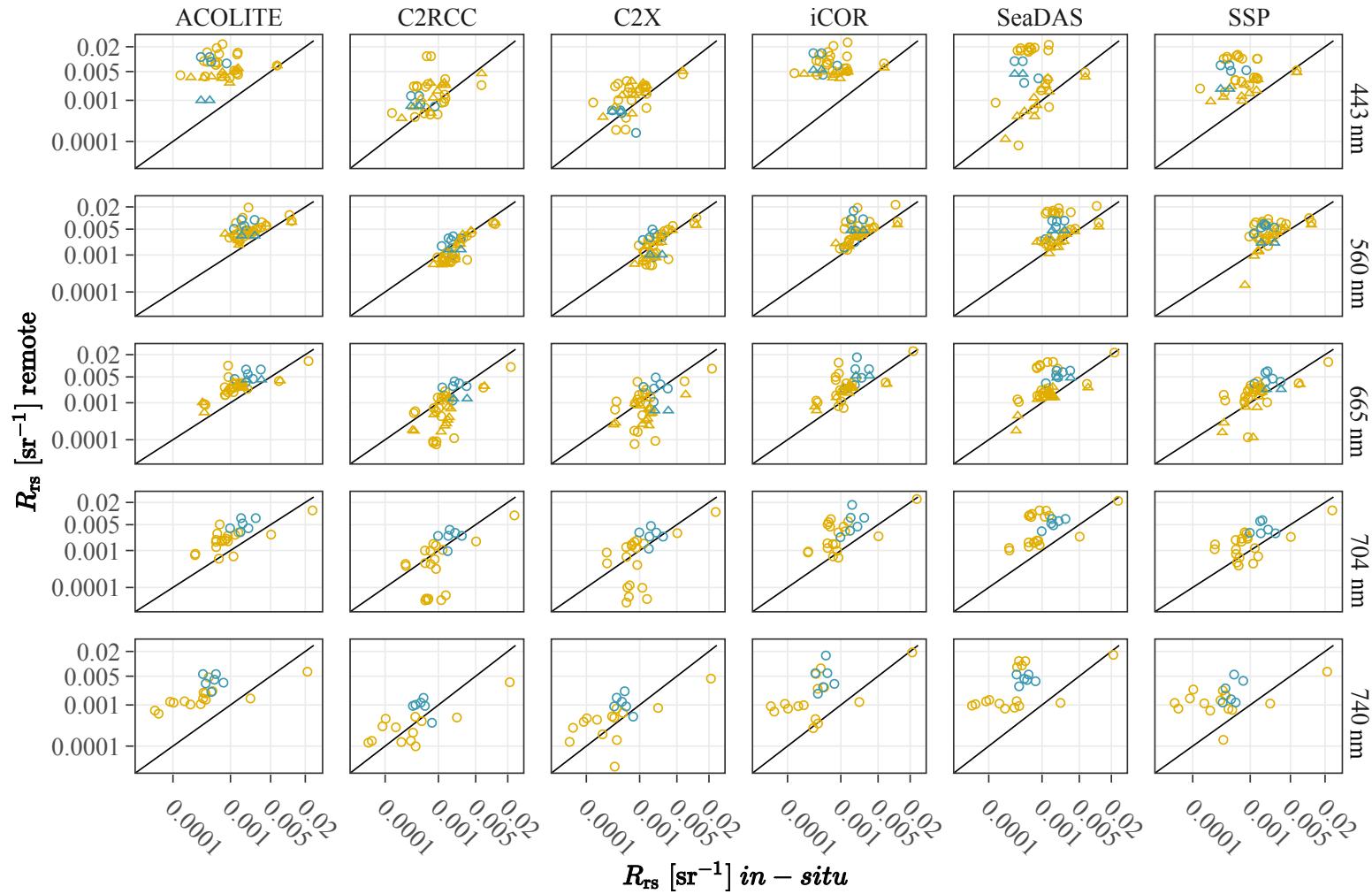


Figure 20: R_{rs} measured *in situ* and remotely in the EGSL (yellow) and in JB (blue) by MSI (circle) and OLI (triangle) in the blue (443 nm), green (560, 561 nm, respectively), red (665, 655 nm, respectively), NIR (704, 740 nm, MSI only) bands. The solid black line represents the 1:1 relation

Table 6: Performance metrics of atmospheric correction algorithms for R_{rs} retrieval by wavelength

Algorithm	Wavelength[nm]	SSPB %	MdSA %	wins %	r^2	slope
ACOLITE	443	858.02	858.02	0.00	0.02	0.45
	560	126.58	126.58	0.00	0.25	0.72
	561	79.76	79.76	6.25	0.52	0.47
	655	114.23	114.23	11.76	0.68	0.69
	665	124.97	124.97	8.33	0.51	0.72
	704	149.29	149.29	8.00	0.5	0.74
	740	485.56	485.56	4.76	0.44	0.42
C2RCC	443	77.16	103.19	39.29	0.15	1.28
	560	-45.35	68.28	48.15	0.54	1.35
	561	-39.66	39.66	18.75	0.79	1.32
	655	-101.78	101.78	5.88	0.51	1.36
	665	-26.53	57.08	37.50	0.34	2.09
	704	-23.68	79.16	32.00	0.29	2.42
	740	40.59	148.72	47.62	0.20	1.19
C2X	443	75.56	84.63	39.29	0.29	1.22
	560	14.18	60.83	33.33	0.39	1.69
	561	-47.17	47.17	6.25	0.67	1.27
	655	-211.28	211.28	17.65	0.32	0.68
	665	23.21	77.83	16.67	0.24	1.95
	704	27.64	112.84	12.00	0.26	2.42
	740	72.55	165.49	19.05	0.20	1.08

Continued on next page

Table 6 – *Continued from previous page*

AC algo	Wavelength[nm]	SSPB %	MdSA %	wins %	r²	slope
iCOR	443	993.08	993.08	3.57	0.00	0.04
	560	107.20	107.20	11.00	0.29	1.5
	561	47.96	59.20	0.00	0.68	0.64
	655	68.54	75.70	0.00	0.71	0.74
	665	117.92	117.92	8.33	0.38	1.12
	704	179.84	179.84	24.00	0.38	1.04
	740	488.40	488.40	19.00	0.31	0.87
SeaDAS	443	228.09	324.19	17.86	0.02	10.50
	560	217.33	217.33	0.00	0.10	2.10
	561	12.15	26.12	31.25	0.36	0.67
	655	29.22	37.39	29.41	0.65	1.12
	665	179.86	179.86	8.33	0.29	102
	704	236.95	236.95	0.00	0.27	0.92
	740	827.72	827.72	0.00	0.31	0.67
SSP	443	361.90	361.90	0.00	0.02	1.10
	560	205.27	205.27	7.41	0.18	0.51
	561	11.19	34.10	37.50	0.66	1.59
	655	21.14	48.77	35.29	0.50	1.67
	665	99.34	104.43	20.83	0.34	1.06
	704	90.82	131.28	24.00	0.35	0.87
	740	351.09	351.09	9.52	0.15	0.35

2.4.3.2 CDOM matchup

The CDOM algorithm based on the red to blue ratio ($R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$) shows an important underestimation with all atmospheric corrections (Figure 21). ACOLITE and iCOR showed very small dynamic range in terms of CDOM retrieval with all (but one for ACOLITE) a_g values $< 1 \text{ m}^{-1}$. The C2X algorithm, which perform better in highly absorptive waters, is able to detect a larger dynamic range for a_g with a slope closer to 1:1, but still systematically underestimate $a_g(440)$ with a SSPB% of -50.65 %. This underestimation comes from the constant overestimation by atmospheric correction of R_{rs} in the blue part of the spectrum from satellite remote sensing.

The use of a red/green reflectance ratio significantly improved CDOM retrieval for all AC algorithms. For example, iCOR and ACOLITE respectively have small positive and negative SSPB of 12.10% and -1.40%, a MdSA of 47.42% and 45.50% respectively. A relatively strong linear relationship indicated by a r^2 of 0.78, is also observed for ACOLITE, suggesting a good preservation of the spatial pattern of CDOM. Therefore, ACOLITE errors seem less random and more systematic. Similarly, C2RCC, SSP and SeaDAS also perform better for $a_g(440)$ retrieval using the red to green band ratio. SeaDAS showed the lowest MdSA (41.59% versus 43.21% and 52.86% for C2RCC and SSP, respectively), while C2RCC show the closest relation to the 1:1 line. SeaDAS points are, however, less dispersed than C2RCC, with an r^2 of 0.62 and 0.43, respectively.

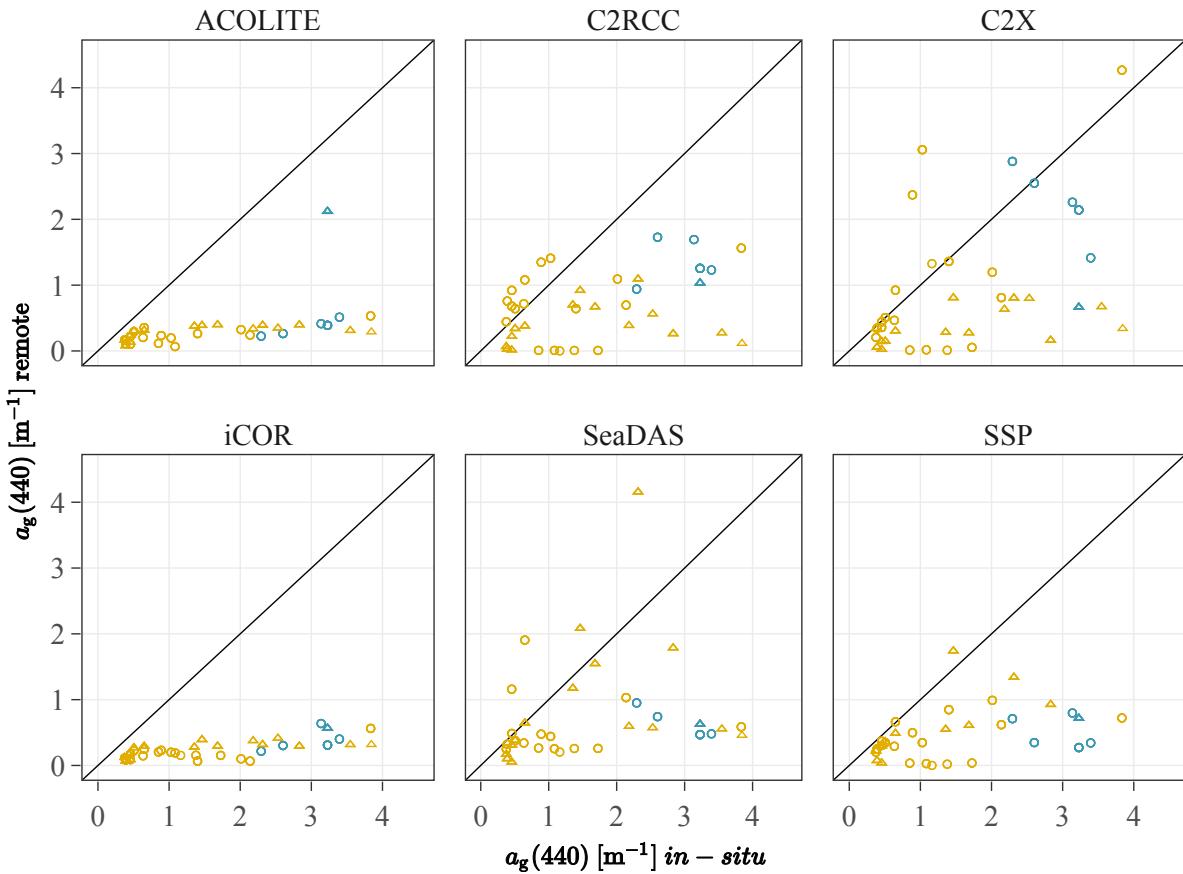


Figure 21: $a_g(440)$ measured *in situ* vs estimated remotely with the red/blue algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.

Table 7: Performance metrics of atmospheric correction algorithms for CDOM retrieval

CDOM algo	AC algo	SSPB %	MdSA %	wins %	r^2	slope
red/blue	ACOLITE	-420.23	420.23	0.00	0.23	0.18
	C2RCC	-118.11	118.11	8.33	0.24	0.26
	C2X	-50.65	81.49	50.00	0.29	0.93
	iCOR	-467.33	467.33	0.00	0.50	0.09
	SeaDAS	-113.57	154.34	29.17	0.01	0.51
	SSP	-196.39	196.39	12.50	0.12	0.12
red/green	ACOLITE	-1.40	45.50	27.59	0.78	0.59
	C2RCC	-16.40	43.21	20.69	0.43	0.95
	C2X	-39.86	85.62	6.90	0.28	0.70
	iCOR	12.10	47.42	17.24	0.61	0.74
	SeaDAS	8.98	41.59	20.69	0.62	0.65
	SSP	-2.89	52.86	6.90	0.24	2.41

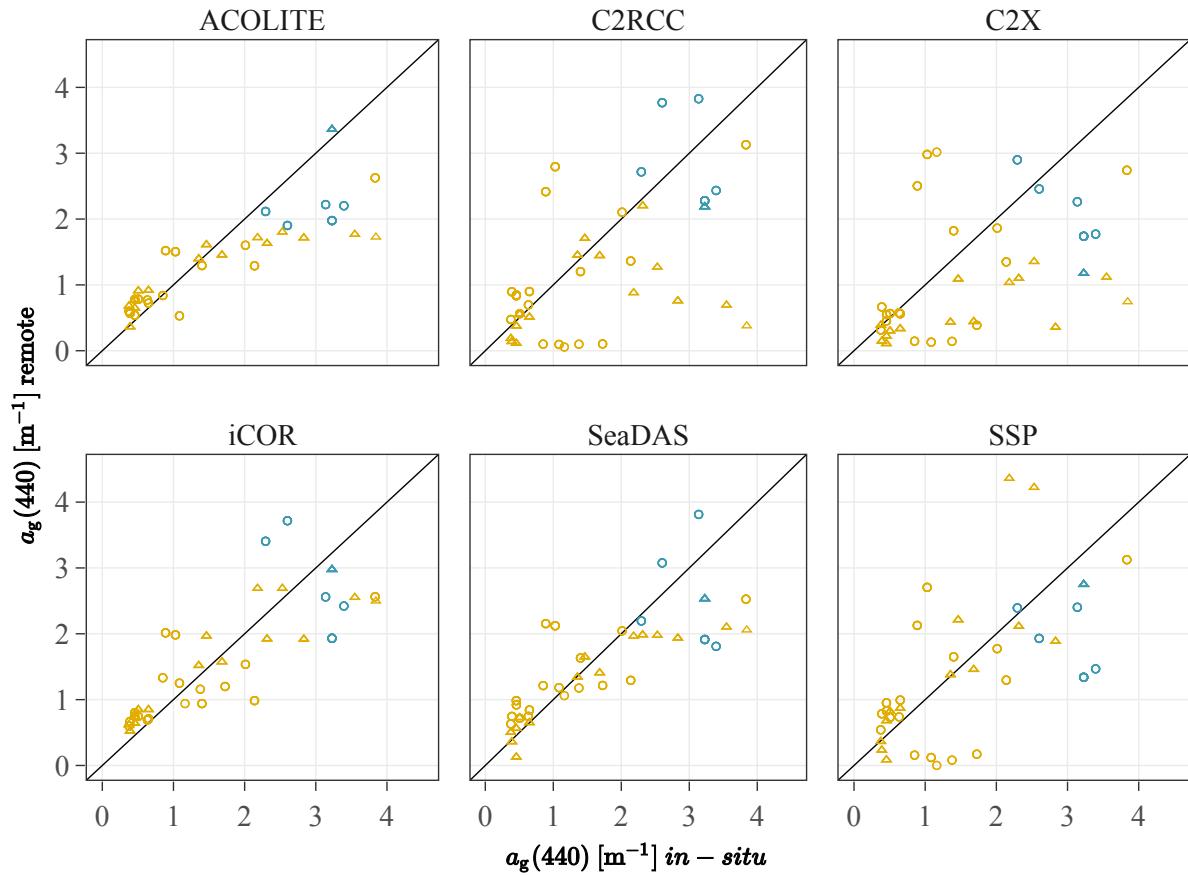


Figure 22: $a_g(440)$ measured *in situ* vs estimated remotely with the red/green algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.

2.4.3.3 SPM matchup

As expected, C_{SPM} retrieval from the single-band algorithm of the EGSL (Figure 23) is challenging due to large mass-specific IOPs variability of SPM in this region (Figures 16 and 18). Those results also show that for the limited matchup points available in JB, all are equally distributed with the EGSL data. This may tell that when it comes to satellite remote sensing, the better precision and accuracy of the C_{SPM} model in JB is lost. Our range of observation spans from 2.11 to 36.40 [mgL^{-1}], but all except one observation are made below 10 [mgL^{-1}]. ACOLITE, iCOR, SeaDAS and SSP show a consistent overestimation of C_{SPM} , as it did for the R_{rs} retrieval. Consistently, SSP performed better than ACOLITE, iCOR and SeaDAS with a SSPB more than twice lower with 28.75% versus 87.45%, 82.33% and 123.07%, respectively.

Table 8: Performance metrics of atmospheric correction algorithms for C_{SPM} retrieval

AC algo	SSPB %	MdSA %	wins %	r^2	slope
ACOLITE	87.45	87.45	3.45	0.76	0.61
C2RCC	-13.35	68.37	13.79	0.62	0.50
C2X	-3.57	79.31	31.03	0.47	0.45
iCOR	82.33	82.33	10.34	0.54	1.46
SeaDAS	123.07	123.07	24.14	0.57	1.43
SSP	28.75	50.26	17.24	0.65	0.61

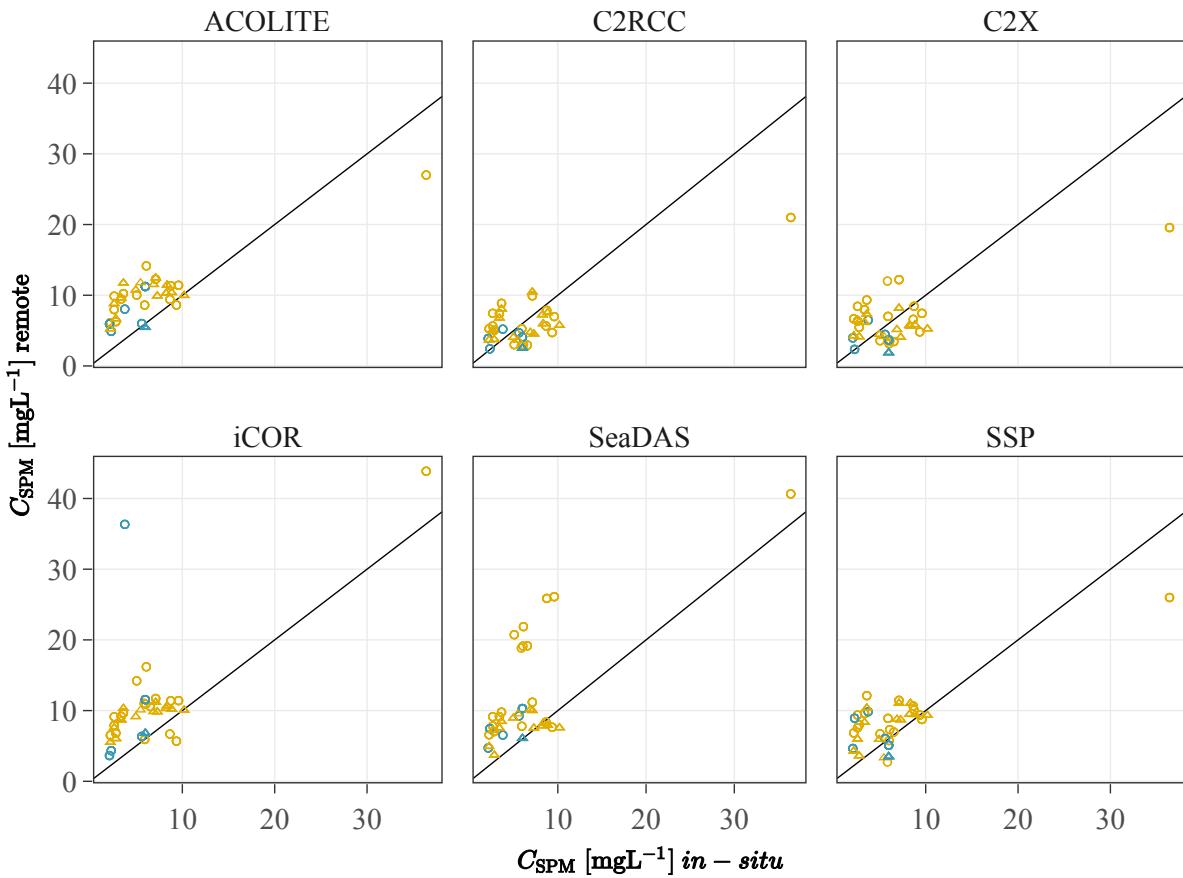


Figure 23: C_{SPM} measured *in situ* vs estimated remotely with the red band algorithm applied to MSI (circle) and OLI (triangle) in the EGSL (orange) and JB (blue). The solid black line represents the 1:1 relation.

2.5 Discussion

Our primary goal in this study was to provide empirical remote sensing algorithms for Québec coastal waters, to retrieve SPM and CDOM concentration. For the CDOM parameter, this has been achieved with a single algorithm and a good level of confidence in both regions. The range of CDOM recorded in Québec coastal waters is similar to other nordic environment such as the Batlic sea (Berthon and Zibordi, 2010; Kowalcuk et al., 2006; Kratzer and Moore, 2018). It indicates that we are working in dark, optically complex of type II waters where it is difficult to accurately link other OACs with radiometric quantities. For the SPM parameter, we found a satisfactory level of confidence for the James Bay region, considering the performance metrics of this specific algorithm. However, the EGSL region appears to be significantly different. The differences among the regions, their probable origin and their consequences in terms of algorithm performance are discussed in the following sections.

2.5.1 Effects of interrelations between CDOM and SPM on R_{rs}

The spectral relation of C_{SPM} , $a_g(440)$ and R_{rs} (Figure 14, A and C) shows that as we shift from lower wavelengths toward longer wavelengths, the relative influence of OACs on R_{rs} shifts from CDOM to SPM. The partition occurs between 560 and 665 nm. Empirical algorithms linking R_{rs} with $a_g(440)$ and C_{SPM} take advantage of opposed physical properties, respectively absorption and scattering. Therefore, those two OACs are expected to act against one another in their effect on R_{rs} . CDOM mainly impacts R_{rs} by absorbing light in lower wavelengths and is generally considered negligible in longer wavelengths. However, our results show that at 665 nm, a_g is significant enough to affect C_{SPM} retrieval (Figure 19). In fact, the residuals of the C_{SPM} algorithm using $R_{rs}(665)$ are positively correlated with $a_g(440)$. The overestimation is associated with low CDOM concentration, and as $a_g(440)$ increases, the relation shifts toward underestimation. As C_{SPM} and R_{rs} relation is positive, it indicates that CDOM absorption masks a part of the SPM signal at least up to 665 nm. This effect is of

greater amplitude at 560 nm where absorption by CDOM and backscattering by SPM, acting against one another, is best seen. Consequently, $R_{rs}(560)$ is not the best-suited reflectance to retrieve C_{SPM} because it needs prior retrieval of CDOM concentration to correct its effect. Contrary to this confounding effect, C_{SPM} has not shown any impact on $a_g(440)$ retrieval, neither from the $R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$ nor the $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ algorithms. This is a surprising result, at least for the $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ residuals, considering that $R_{rs}(560)$ seems to be under the equal influence of SPM and CDOM and that $R_{rs}(665)$ is directly related to C_{SPM} . Yet all results indicate that $a_g(440)$ can be retrieved from the $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ algorithm without any confounding effect coming from SPM.

2.5.2 Linking R_{rs} ratio and $a_g(440)$

The end member approach recently published (Hooker, Matsuoka, et al., 2020; Houskeeper et al., 2021) showed good results to retrieve CDOM concentration for a wide different range of water type. These authors argue that CDOM absorption can be retrieved using $[L_w]_N$ ratio of UV to NIR bands, if available, or the extremity of the visible spectral range (e.g., 412 and 670 nm). Due to the limited number of bands on satellite sensors targeted in this study (MSI and OLI), the shortest wavelength available in the blue is 440 nm, but red (665) and NIR (740) bands are available for MSI. It shows good results with our dataset. However, the maximum value of $a_g(440)$ in their dataset is below 2 m^{-1} and miss an interesting pattern that appears in our dataset. In fact, the relation between $a_g(440)$ and $R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$ show an exponential decay for $a_g(440)$ values above 2 m^{-1} . This tendency can be explained by the fact that as CDOM concentration increases the marine reflectance signal at 440 nm will reach an asymptotic value toward zero, resulting in a slope that will also tend toward zero. As the original work of Houskeeper et al. (2021) presented the $R_{rs}(740)/R_{rs}(440)$ ratio we chose to also present it under the same form. Our results show that CDOM in the EGSL and in JB cannot be retrieved directly and simultaneously for both environment as a regional separation appear in the relation of $a_g(440)$ with this reflectance ratio. Our results also show no significant regional differences for the retrieval of CDOM from the band ratio

algorithm. In fact, the CDOM spectral shapes between the two regions were not statistically different, with a spectral slope calculated for 350 to 500 nm spectral range of 0.0175 ± 0.0006 and $0.0167 \pm 0.0010 \text{ nm}^{-1}$ for JB and EGSL, respectively. These spectral slopes are typical of coastal environments influenced by terrigenous input of CDOM (Babin et al., 2003). This mean that the regional separation of $a_g(440)$ relation with $R_{\text{rs}}(740)/R_{\text{rs}}(440)$ is likely to come from the confounding effect of different regional $b_{\text{bp}}^{*C_{\text{SPM}}}$.

Interestingly, CDOM matchup analysis brings forward the advantage of using algorithms based upon red to green band ratio, which is less sensitive to atmospheric correction errors (Figure 21). As noted in the matchup analysis, a significant underestimation error is associated with using R_{rs} in the blue, as atmospheric correction algorithms tend to overestimate R_{rs} in these wavelengths. Furthermore, performance metrics show that there is no difference between the CDOM algorithms using $R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(440)$ and $R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(560)$. The assumption that CDOM absorption power and its variability are more significant at lower wavelengths does not hold in these waters. It is responsible for a significant amount of absorption in the green. Indeed, several other studies have put forward the use of red to green ratio to estimate CDOM contration (Ficek et al., 2011; Kutser, Pierson, et al., 2005; Odermatt et al., 2012; Zhang, Zhou, et al., 2021; Zhu et al., 2014). Considering these points, the $R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(560)$ algorithm should be used in the EGSL and JB to provide accurate measurements of $a_g(440)$. Similar results were obtained in northern inland waters: boreal lake of europe (Kutser, Paavel, et al., 2012; Kutser, Pierson, et al., 2005); lakes of Yamal peninsula, Russia (Dvornikov et al., 2018); lakes of Minnesota, US (Brezonik et al., 2005; Menken et al., 2006).

2.5.3 Linking C_{SPM} and R_{rs}

The C_{SPM} relationship with R_{rs} is different between the EGSL and JB. In JB this relationship is strong enough to derive an acceptable model for C_{SPM} from R_{rs} . The physical quantity $b_{\text{bp}}^{*C_{\text{SPM}}}$, required for this regression to be accurate, is sufficiently constant as shown

by Figure 19A. The semi-analytical approach proposed by Nechad et al. (2010) give results similar to those that we propose for JB and thus show that this kind of algorithm is appropriate for this kind of environment. In the EGSL however the $b_{bp}^{*C_{SPM}}$ vary widely with C_{SPM} . The difference of $b_{bp}^{*C_{SPM}}$ between the EGSL and JB may be explained by the mineralogical composition of SPM, the adsorption of organic matter, as well as by the type of flocs encountered. In particular, the particles encountered in the EGSL have very low backscattering efficiency compare to other coastal regions (Neukermans, Loisel, Mériaux, Astoreca, and McKee, 2012), most likely due to large organic fraction (Araújo and Bélanger, in revision). Mohammadpour, Gagné, et al. (2017) reported values of $0.1 \text{ m}^2 \text{ g}$ for the total mass-specific scattering coefficient of SPM ($b_p^{*C_{SPM}}$) in the lower estuary of the St Lawrence, which is in the same range as the values reported here assuming a backscattering to scattering ratio of 1.8%. In contrast, $b_{bp}^{*C_{SPM}}$ of JB ($0.014 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) are closer to the values reported for mineral particles (Neukermans, Loisel, Mériaux, Astoreca, and McKee, 2012; Reynolds et al., 2016). As Nechad et al. (2010) have stated, the use of a single band algorithm to retrieve C_{SPM} is based on the assumption of no variability in $b_{bp}^{*C_{SPM}}$. Our results show that such assumption is not met for the coastal waters of the EGSL. In fact the water masses of this region are stratified horizontally (Saucier et al., 2003), with upwelling zones and river plumes that can have a considerable effect in coastal area. Seasonal variability in the distribution and stratification of those water masses could also gave a sensible explanation for the observed variability of $b_{bp}^{*C_{SPM}}$.

Previous studies conducted in the EGSL (Larouche and Boyer-Villemaire, 2010; Mohammadpour, 2016; Mohammadpour, Gagné, et al., 2017; Mohammadpour, Montes-Hugo, et al., 2015; Montes-Hugo, Roy, et al., 2012; Montes-Hugo and Mohammadpour, 2012; Montes-Hugo and Mohammadpour, 2013) on the retrieval of C_{SPM} from marine reflectance have shown the difficulty to build solid empirical algorithms for this parameter, in an environment dominated by CDOM. Algorithms to retrieve C_{SPM} concentration in the EGSL have been previously developed and published in (Larouche and Boyer-Villemaire, 2010; Montes-Hugo, Roy, et al., 2012) and specifically for the maximum turbidity zone of the

Saint-Lawrence estuary (Mohammadpour, Montes-Hugo, et al., 2015). Surprisingly, Montes-Hugo, Roy, et al. (2012) publication used a band ratio of $R_{rs}(670)/R_{rs}(560)$ as a dependent variable of their C_{SPM} algorithm, which was not successful for our dataset (result not shown). Mohammadpour, Montes-Hugo, et al. (2015) published a power-law algorithm for C_{SPM} as a function of $R_{rs}(708)/R_{rs}(665)$ and reported an r^2 of 0.687. We tested the formula they proposed, as band ratio algorithms have been used successfully in other estuarine environments (Doxaran, Cherukuru, et al., 2005; Doxaran, Froidefond, et al., 2002). However, with a Mean AE of 4.45 and 5.97 for the EGSL and JB, respectively, we do not consider it satisfying. In fact, this low accuracy is well represented in Figure 18C) as data points are widely dispersed. The interrelation of different optically active constituents and their effects on marine reflectance bring non-uniqueness in the solution to the inverse modelling of ocean color. It has been shown by Defoain-Platel and Chami (2007) that a significant part of inversion error in optically complex coastal waters originate from the non-uniqueness of the solution. Considering the high level of variability observed with the R_{rs} versus C_{SPM} relation in the EGSL, it is likely that the single band or band ratio algorithms suffers from this kind of error. To avoid such ambiguity, it is necessary to use as much spectral information as is available in terms of shape and magnitude. In fact, single band algorithms used only the magnitude of the reflectance at a single wavelength, while band ratio algorithms destroy the magnitude information to keep only a small part of the spectral shape. Considering the low efficiency of particulate backscattering specific to concentration in the EGSL (Table 3), even in relatively low CDOM concentration a_g may have an overwhelming effect compared to the b_{bp} . As the b_{bp} is the physical phenomenon allowing the use of R_{rs} as a direct proxy of C_{SPM} , it may be an explanation for the poor result of the C_{SPM} algorithm in the EGSL. The measurement methodology may cause the poor correlation between b_b and C_{SPM} in the EGSL. The following section will try to provide an explanation of the missing component in the b_b vs C_{SPM} relation in the EGSL.

2.5.4 Positive correlation of CDOM and R_{rs} at 665 and 740 nm

The positive correlation between CDOM and R_{rs} at 665 and 740 nm (Figure 14 c) may be partly attributed to the co-occurrence of high C_{SPM} and CDOM events. As we previously stated, the SPM backscattering effect is more significant than absorption by CDOM in these wavelengths. However, it does not seem to explain it thoroughly, as many high CDOM concentration events are not co-occurring with high C_{SPM} , as shown in Figure 15. It means that a part of the backscattering is not related to the C_{SPM} measurements. To understand this mismatch, we need to go back to the methodology used to measure C_{SPM} , CDOM and b_b . First, C_{SPM} and CDOM are measured in the laboratory using filters whose pore size or capacity to retain specific size of particulate matter acts as the limits for what is operationally defined as dissolved and particulate. This limit is 0.7 μm and 0.2 μm for C_{SPM} and CDOM, respectively. On the opposite, b_b is measured *in situ* with little disturbance of the observing instrument on the observed medium. The *in situ* readings are done on the bulk effect of all water constituents. If we consider the methodology, the mismatch between C_{SPM} and b_b occurs in the arbitrary operational limit of what is defined as particulate and dissolved. In fact, a part of what is defined as CDOM is actually composed of particles smaller than 0.2 μm , the colloids, which can be very effective at scattering (Stramski et al., 2004). Furthermore, we can note that particles in the range of 4 μm to 0.2 μm are missing from both the C_{SPM} and CDOM operational definition and add to the mismatch between constituents and optical properties of water. Several methods can be used to address this mismatch, including theoretical modeling and instrumental measurement. Considering that instrumental measurement is not an option applicable *a posteriori*, it cannot complement the existing dataset analyzed here. On the other hand, theoretical modeling can be such a *a posteriori* analysis. Inversion techniques from the VSF could be used to retrieve sub-populations of SPM, following a method called the reductionist approach. It is indeed this approach that as led Zhang, Huot, et al. (2013) to hypothesise the contribution of CDOM to backscattering. This approach may help us understand the wide variability of the SPM and the R_{rs} in the EGSL and maybe develop an

algorithm more efficient to retrieve C_{SPM} in this environment.

2.5.5 Matchup analysis and atmospheric correction comparison

The matchup analysis have shown that the six atmospheric correction algorithms compared, performed differently in term of R_{rs} , $a_g(440)$ and C_{SPM} retrieval. No algorithm is found to give the best performance for every target product. Both end of the visible spectrum were the most difficult to accurately retrieved, as it approach null reflectance due to the high absorption in the water column.

For 443 nm, Pahlevan, Mangin, et al. (2021) report that iCOR give the best results for water types dominated by CDOM. In this analysis, it is the algorithm giving the largest error with a SSPB of 993.08%. Instead its C2X, a version of the C2RCC neural network trained for extremely absorptive water that give the best results. This could be expected as the coastal water of Québec, specifically the North Coast and JB are most often loaded with CDOM that absorb most of the blue radiation. Considering this difficulty in front of which all others algorithm failed, C2X show even a relatively good performance at retrieving $a_g(440)$ from the red/blue ratio. In fact, iCOR MdSA for CDOM retrieval from the red/blue ratio is 81.49% slightly lower and close to the MdSA of 84.63 % for $R_{\text{rs}}(443)$ retrieval. However, the C2X give error similar for the red/green and the red/blue algorithm, showing its limits as an algorithm useful in extreme cases. The CDOM red/green algorithms show better performance with ACOLITE algorithm, with the distribution of the point clearly represent the quasi null systematic error of the retrieval (SSPB of -1.40%). This may indicate that ACOLITE better preserves the spectral shape of R_{rs} . We also found the SeaDAS and SSP algorithms yield better retrievals for OLI compare to MSI, consistent with the findings of Pahlevan, Mangin, et al. (2021).

The single red band algorithm for C_{SPM} shows a wide error for each atmospheric correction algorithm compared (Table 8). This may be directly related to the poor performance

of the C_{SPM} algorithm tested with the *in situ* data, and may not represent the remote sensing retrieval performance. However, as the C_{SPM} algorithm is based on a single band in the red, the remote sensing errors can be directly related to the R_{rs} retrieval errors and the algorithm uncertainty itself. Therefore the use of a fit for purpose atmospheric correction may be a suitable choice to apply this algorithm Pahlevan, Mangin, et al. (2021). With the least MdSA (<80%) and an acceptable bias (<20%), the neural nets (C2RCC and C2X) and SSP algorithms seem to be appropriate choices.

2.6 Conclusion

We developed empirical algorithms to retrieve C_{SPM} and $a_g(440)$ in the coastal waters of Québec, dominated by high concentration of terrigenous CDOM from boreal watersheds. However, the retrieval of C_{SPM} in nearshore waters of the northern EGSL have shown the challenges to empirically link the concentration of this constituent with the optical properties. SPM is a generic term covering a wide diversity of particles assemblage, mineralogy, organic content, or flocs. Here we only characterized SPM in terms of concentration (C) of total dry mass, as well as its inorganic/organic fractions. Acquiring information more specific to the SPM composition such as the mineralogy, the particle size distribution, as well as microphotography of particles and flocs would help to identifies the specificities of the variability observed in the nearshore EGSL. Furthermore, the methodology limitation in terms of C_{SPM} measurement (i.e. gravimetric method) and possible alternative or complementary methods such as counting the particles size distribution, would greatly help us to improve our understanding of this subject. In this paper we only present simple empirical formulation to relate C_{SPM} to R_{rs} . Using more sophisticated methods such as semi-analytical inversion algorithm, could be an adequate solution to the weak statistical relationship we found in the EGSL, to bridge the gap between C_{SPM} and $b_{\text{bp}}^{*\text{SPM}}$. The matchup analysis for this dataset have been only performed for the Sept-Îles bay due to time constraint. Further work should include a full analysis with every matchups available for both the EGSL and the James bay.

The main findings and conclusions of this study can be summarized as follow.

- Based in *in situ* observations $a_g(440)$ is similarly related to $R_{rs}(665)/R_{rs}(440)$ or $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ band ratio algorithms.
- $a_g(440)$, however, is best retrieved by the $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ algorithm when estimated using space-borne sensors such as OLI and MSI due to lower error in R_{rs} retrieval in these bands after atmospheric correction. In our study area, ACOLITE dark fitting algorithm yield the best $a_g(440)$ retrievals.
- C_{SPM} can be efficiently retrieved in eastern nearshore coastal waters of James Bay with a red single band algorithm.
- C_{SPM} in the EGSL cannot be precisely retrieved from R_{rs} nor from b_{bp} due to a large variability in mass-specific IOPs due to heterogeneous nature of SPM in this region, and to some extent, due to the confounding effects of CDOM in these dark waters. Clues have been given by the positive correlation of $a_g(440)$ and $b_b(532)$ indicating that very small particles ($< 0.2 \mu\text{m}$) may be the missing component, invisibly increasing b_{bp} .
- Additional work including the methodology bias in the gravimetric method and definition of SPM from an optical point of view is needed to further investigate the SPM and ocean color relationship in the EGSL. Characterisation of SPM in term of mineralogy, particle size distribution and chemical analysis of the organic fraction would be necessary steps to understand the variability of the b_{bp}^{*SPM} in the EGSL.

2.7 Annex

Table 9: Sensor specific coefficients for $a_g(440)$ and C_{SPM} algorithms

Parameter	Region	Sensor	Equation
$a_g(440)$	-	OLI	$24\log_{10}(R_{\text{rs}}(655)/R_{\text{rs}}(561) + 1)^{1.9}$
		MSI	$20\log_{10}(R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(560) + 1)^{1.8}$
		OLCI	$20\log_{10}(R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(560) + 1)^{1.8}$
		MODISA	$17\log_{10}(R_{\text{rs}}(667)/R_{\text{rs}}(555) + 1)^{1.7}$
		MERIS	$20\log_{10}(R_{\text{rs}}(665)/R_{\text{rs}}(560) + 1)^{1.8}$
		SeaWiFS	$18\log_{10}(R_{\text{rs}}(670)/R_{\text{rs}}(565) + 1)^{1.7}$
$\log_{10}C_{\text{SPM}}$	EGSL	OLI	$2.6R_{\text{rs}}(655)^{0.17}$
		MSI	$2.8R_{\text{rs}}(665)^{0.18}$
		OLCI	$2.8R_{\text{rs}}(665)^{0.18}$
		MODISA	$2.8R_{\text{rs}}(667)^{0.18}$
		MERIS	$2.8R_{\text{rs}}(665)^{0.18}$
		SeaWiFS	$2.9R_{\text{rs}}(670)^{0.18}$
JB	JB	OLI	$13(R_{\text{rs}}(655)^{0.52}$
		MSI	$13R_{\text{rs}}(665)^{0.52}$
		OLCI	$13R_{\text{rs}}(665)^{0.52}$
		MODISA	$13R_{\text{rs}}(667)^{0.52}$
		MERIS	$13R_{\text{rs}}(665)^{0.52}$
		SeaWiFS	$13R_{\text{rs}}(670)^{0.53}$

CONCLUSION GÉNÉRALE

Développement inattendu

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire ne présente en définitive qu'une partie de la recherche initialement proposée dans le devis de maîtrise. Une des contraintes principales ayant considérablement retardé l'échéancier est la complexité de la base de données analysée. Celle-ci comprend pas moins de 13 variables mesurées sur différentes dimensions, notamment la latitude, la longitude et la profondeur, mais aussi sur la longueur d'onde. La longueur d'onde est une dimension qui peut être observée à trois points différents éloignés par des instruments multispectraux et jusqu'à plus de 400 points contigus par des instruments hyperspectraux. De plus, ces variables ont été acquises au cours de quatre projets différents, avec des instruments et des configurations distinctes. L'absence de standardisation des procédures de stockage, de traitement et de partage de données se révèle être un défi majeur à leur utilisation efficace dans le but de répondre à un objectif de recherche. Ainsi, environ une année a été nécessaire au traitement et à l'assemblage de la base de données dans sa forme finale. Considérant qu'une partie des données présentées ici est restée à un niveau de traitement préliminaire jusqu'à un stade avancé de cette recherche, j'ai choisi de ne pas passer par l'utilisation de scripts à usage unique. Ceux-ci n'auraient vraisemblablement été utiles qu'à un moment donné et auraient dû être ré-écrits à chaque changement d'état des données. De plus, il n'est pas logique d'écrire quatre codes différents (un pour chaque projet) ayant exactement le même but. J'ai donc choisi de repartir de la base, en utilisant la structure de fichier déjà existante au laboratoire Aquatel et en la généralisant pour permettre son utilisation avec chaque projet. Le développement de cette structure s'est fait en suivant les concepts généraux de la gestion des données et particulièrement en ce qui a trait à la notion d'unité observationnelle et d'environnement pour l'assurance qualité. Cette structure générique a permis l'écriture de codes automatisant largement la manipulation, et dans une certaine mesure le traitement des données, à travers leur cycle de vie. L'automatisation réduit les erreurs humaines dans les

tâches répétitives où l'intervention humaine n'est pas nécessaire. À contrario, il ne faut pas surestimer la capacité d'un programme informatique. Tenter d'automatiser des tâches complexes, comme le traitement et le contrôle qualité, tâches qui nécessitent des connaissances et une prise de décision réfléchie, peut s'avérer contre-productif. Le but ici n'est pas de remplacer l'être humain, mais bien d'alléger sa tâche dans les domaines où l'ordinateur est plus efficace. Cela permet de diminuer la charge de travail et mentale, tout en augmentant le niveau de confiance des personnes impliquées dans un processus commun. Bien que je n'avais pas prévu le temps que prendrait cette étape du projet, elle s'est révélée indispensable pour permettre de développer un niveau de confiance adéquat dans les données. Condition fondamentale à une analyse rigoureuse, la citation de Jhon Maeda figurant dans les liminaires de ce mémoire sonne juste.

Principaux Résultats

Le principal objectif de ce travail, développer des algorithmes empiriques régionaux pour la télédétection du CDOM et des SPM, a été rempli. Pour le CDOM, nous avons démontré qu'un algorithme unique basé sur le ratio $R_{rs}(665)/R_{rs}(560)$ fonctionne aussi bien dans la baie James que dans l'EGSL. De plus l'exercice de validation par les *matchups* de la baie de Sept-Îles à montré que le ratio de bande rouge sur verte est préférable au ratio de bande rouge sur bleue. En effet l'erreur associée aux corrections atmosphériques dans le bleu se répercute sur la performance de ce ratio de bandes. Relier les SPM au signal de réflectance marine s'est avéré plus difficile que prévu. Si un algorithme basé sur une bande unique dans le rouge fonctionne relativement bien dans la baie James, les résultats de celui-ci ne sont pas satisfaisants dans l'EGSL. Les autres formulations d'algorithmes testées, notamment les ratios de bandes proposées par Doxaran, Cherukuru et al. (2005) et Gitelson et al. (1993), ont donnés de mauvais résultats dans les deux environnements. Améliorer la performance des algorithmes pour la SPM demanderait certainement d'une part, l'utilisation d'une formulation semi-analytique telle que décrite par (Binding et al., 2010). D'autre part, il semble probable

que la définition opérationnelle de ce que l'on nomme Matière Particulaire en Suspension crée une dé-corrélation avec les propriétés optiques dans l'EGSL. En effet, la méthode gravimétrique, soit l'utilisation de filtre en fibre de verre retenant des particules d'une taille supérieure à 0.4 µm peut s'avérer problématique. Une réflexion et une étude spécifique sur les matières en suspension et leurs propriétés optiques dans l'EGSL, permettraient d'améliorer l'état de nos connaissances sur le sujet.

Perspectives

Le port de Sept-Îles est à la fois source de développement et de perturbations du milieu naturel. Le port en lui-même est directement associé à un trafic maritime soutenu, avec 473 navires en 2019, dont 98 % de transport commercial relié aux activités industrielles implantées autour de la baie. Les aléas technologiques associés à ces activités industrielles représentent un risque concret, tel le déversement pétrolier de septembre 2013 ou le déversement d'eau contaminée par du minerai de fer le 2 juin 2018. Au titre de ce dernier exemple, il est intéressant d'observer l'image Planet Scope de la Baie de Sept-Îles acquise le 3 juin 2018 (Figure 24).

Bien qu'il soit impossible d'affirmer que le panache rougeâtre observé au sud de la baie, le long de Pointe-Noire, provient du déversement minier, ces événements coïncident étonnamment. De plus, la position de ce panache semble correspondre au schéma conceptuel de l'hydrodynamique de la baie de Sept-Îles réalisé par Jean-Luc Shaw (Shaw, 2019). Selon ce schéma, le déversement d'eau rougeâtre chargé d'oxyde de fer signalé le samedi 2 juin aux alentours de 14 h 30, heure locale, aurait suivi le patron de circulation cyclonique des courants de surface de la baie. L'image du dimanche 3 juin acquise à 10 h 32, heure locale, montrerait donc que cette masse d'eau polluée aurait parcouru une vingtaine de kilomètres en une vingtaine d'heures, indiquant une vitesse approximative de 27 cms^{-1} comparable à la vitesse moyenne de 17.4 cms^{-1} enregistrée dans la baie de Sept-Îles à l'aide de bouées

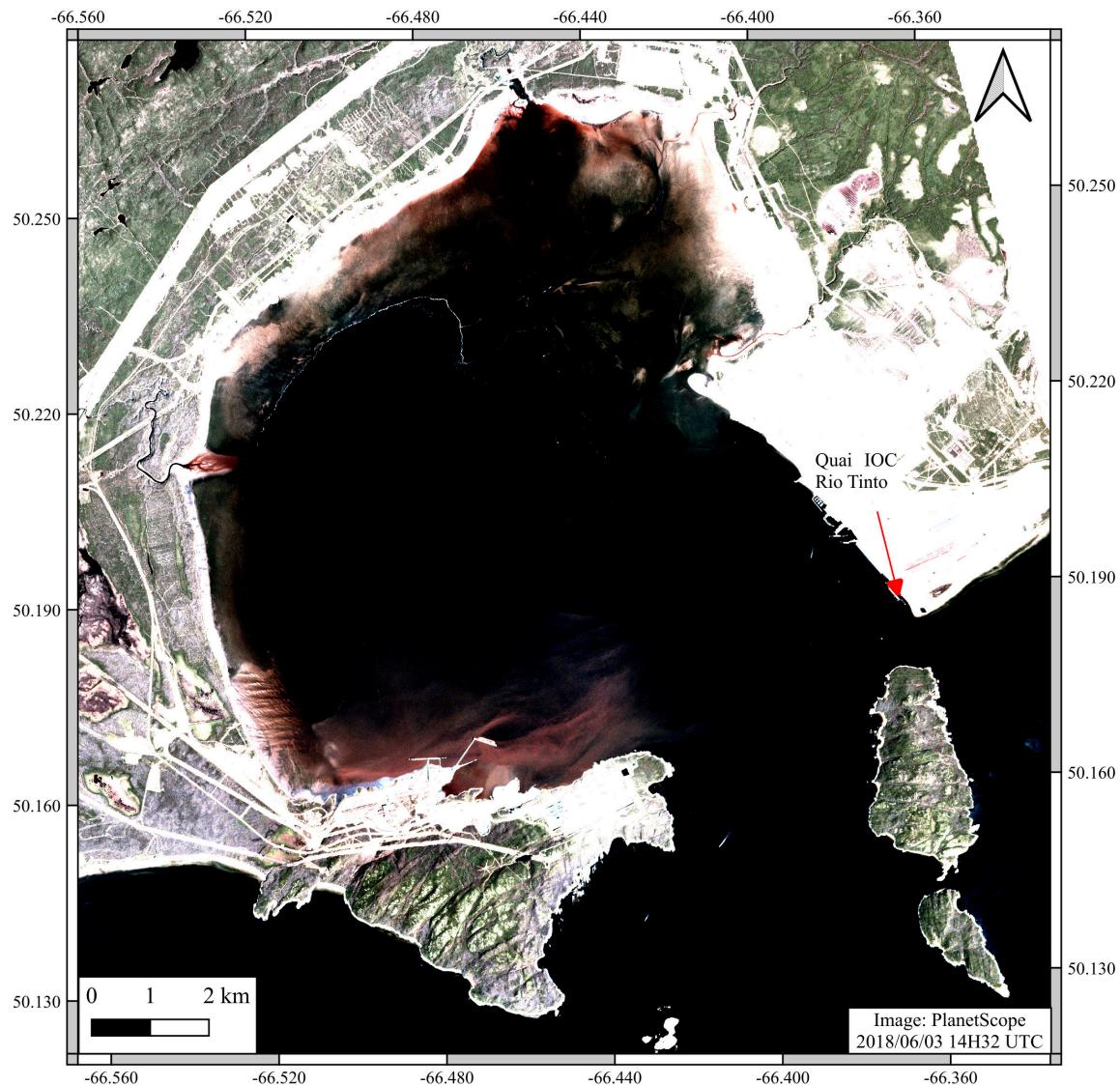


Figure 24: Composé coloré RGB PlanetScope de la Baie de Sept-Îles acquise le 03 Juin 2018 à 14H32 UTC.

dérivantes. Les rapports de données historiques de Météo Canada pour les stations de Sept-Îles et de Pointe-Noire nous apportent d'autres informations intéressantes. Les données de la station de Sept-Îles indiquent que les seules précipitations enregistrées entre le 30 mai et le 3 juin 2018 sont 3.5 mm de pluie le 1er juin. Il est donc peu probable que ce panache ait été généré par le ruissellement dû aux précipitations. Concernant le vent, cette station a enregistré des rafales maximales d'environ 45 kmh^{-1} , soufflant de 10 à 30 degrés du nord géographique, le 1 er et le 2 juin. Venant du nord-nord-est, elles ne peuvent être à l'origine du transport de poussière de fer depuis Pointe-Noire. La journée du 3 la vitesse de rafale maximale était de 37 kmh^{-1} , ces rafales provenant du sud pourraient aussi être à l'origine de la couleur de l'eau observée le long de Pointe-Noire.

Des techniques d'analyse quantitative pourraient venir compléter ce type d'analyse principalement qualitative. Par exemple, il est possible d'estimer les courants de surface à partir de paire d'images Landsat 8 et Sentinel 2 acquises à une dizaine de minutes d'intervalle, en utilisant des algorithmes de flux optique (Figure 25) ou la vélocimétrie par image de particules (Figure 26).

Les figures sont présentées à titre d'exemples. En effet, ces techniques ne sont pas aisément applicables à l'imagerie satellitaire et devraient faire l'objet d'un travail de recherche à part entière. Toutefois, il semble pertinent de continuer dans cette direction. Si l'on arrivait à dériver avec fiabilité les courants de surface par cette méthode, cela ouvrirait de nouvelles opportunités pour la validation des modèles numériques de courants. À cet égard, la synergie entre les technologies d'observation et de modélisation offre des pistes prometteuses pour le développement des sciences et de la connaissance.

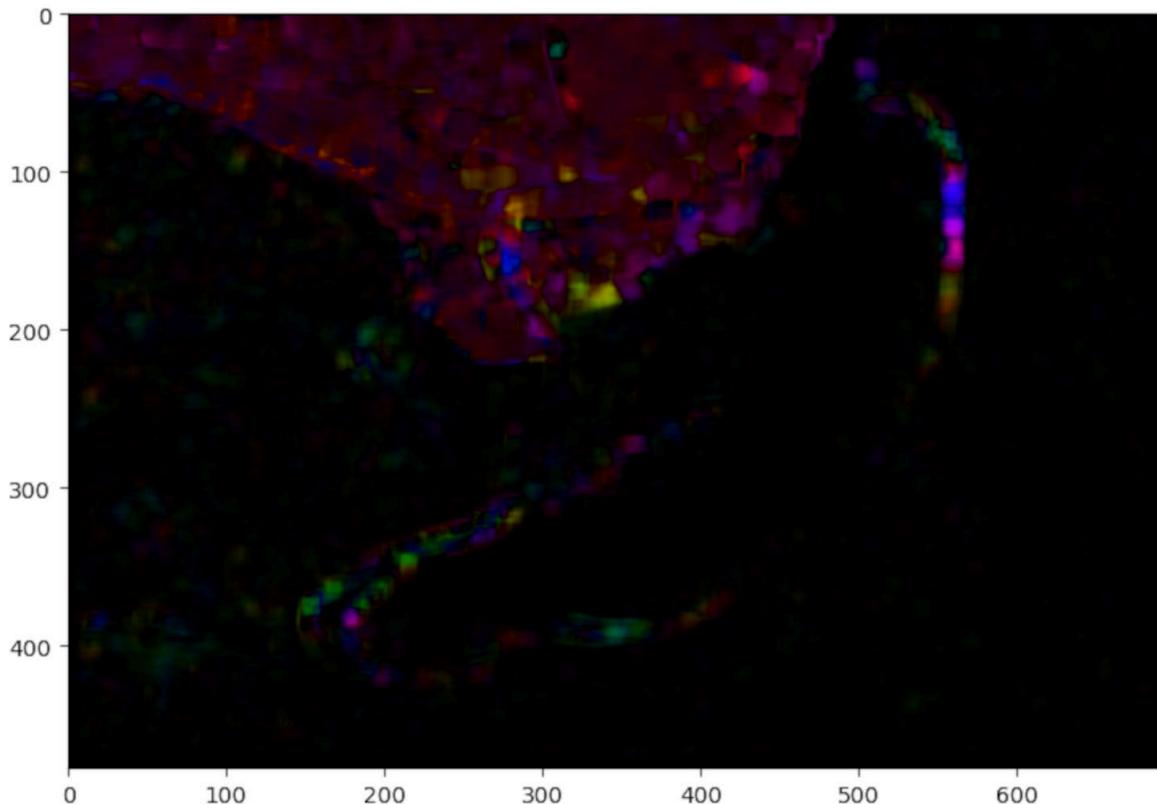


Figure 25: Résultat de l'algorithme de flux optique dense de Farneback (librairie python OpenCV), les couleurs et l'intensité correspondes respectivement à la vitesse et la direction, mais en absence de légende ne sont pas interprétable.

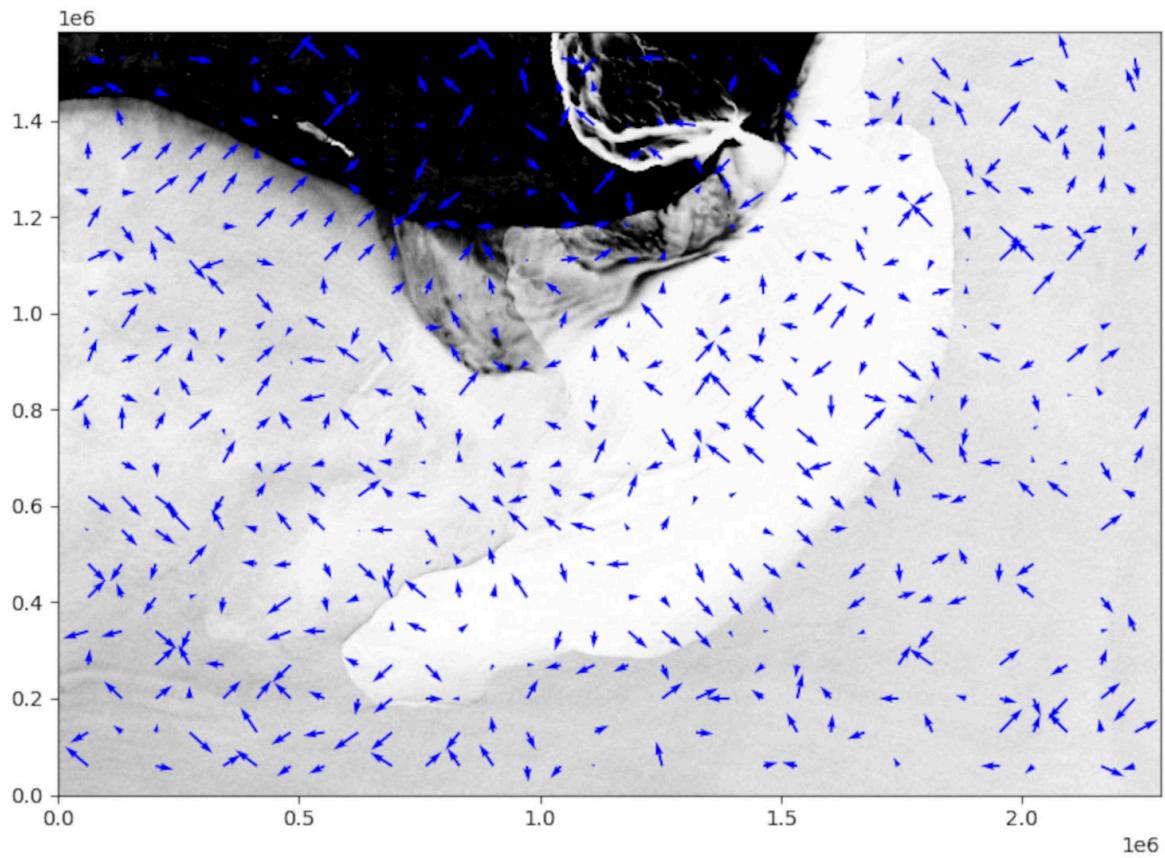


Figure 26: Résultat de l'algorithme de PIV (librairie python OpenPIV)

BIBLIOGRAPHY

- Antoine, D. (1998). Apports de la télédétection spatiale de la «couleur de l'océan» à l'océanographie.pdf. *Océanis*, 24(2), 81–150.
- Antoine, D., Hooker, S. B., Bélanger, S., Matsuoka, A., & Babin, M. (2013). Apparent optical properties of the Canadian Beaufort Sea – Part 1: Observational overview and water column relationships. *Biogeosciences*, 10(7), 4493–4509.
- Araújo, C., & Bélanger, S. (in revision). Variability of bio-optical properties in nearshore waters of the Estuary and Gulf of St. Lawrence: absorption and backscattering coefficients.
- Aurin, D., Mannino, A., & Franz, B. (2013). Spatially resolving ocean color and sediment dispersion in river plumes, coastal systems, and continental shelf waters. *Remote Sensing of Environment*, 137, 212–225.
- Babin, M., Stramski, D., Ferrari, G. M., Claustre, H., Bricaud, A., Obolensky, G., & Hoepffner, N. (2003). Variations in the light absorption coefficients of phytoplankton, nonalgal particles, and dissolved organic matter in coastal waters around Europe. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 108(C7).
- Bélanger, S., Carrascal-Leal, C., Jaegler, T., Larouche, P., & Galbraith, P. (2017). Assessment of Radiometric Data from a Buoy in the St. Lawrence Estuary [Publisher: American Meteorological Society Section: Journal of Atmospheric and Oceanic Technology]. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 34(4), 877–896.
- Berthon, J.-F., & Zibordi, G. (2010). Optically black waters in the northern Baltic Sea. *Geophysical Research Letters*, 37(9).
- Binding, C. E., Jerome, J. H., Bukata, R. P., & Booty, W. G. (2010). Suspended particulate matter in Lake Erie derived from MODIS aquatic colour imagery. *International Journal of Remote Sensing*, 31(19), 5239–5255.
- Boss, E., Pegau, W. S., Lee, M., Twardowski, M., Shybanov, E., Korotaev, G., & Baratange, F. (2004). Particulate backscattering ratio at LEO 15 and its use to study particle composition and distribution. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 109(C1).
- Brezonik, P., Menken, K. D., & Bauer, M. (2005). Landsat-based Remote Sensing of Lake Water Quality Characteristics, Including Chlorophyll and Colored Dissolved Organic Matter (CDOM). *Lake and Reservoir Management*, 21(4), 373–382.
- Brockmann, C., Doerffer, R., Peters, M., Kerstin, S., Embacher, S., & Ruescas, A. (2016). Evolution of the C2RCC Neural Network for Sentinel 2 and 3 for the Retrieval of Ocean Colour Products in Normal and Extreme Optically Complex Waters [Conference Name: Living Planet Symposium], 740, 54.
- Chen, J., Zhu, W., Tian, Y. Q., & Yu, Q. (2020). Monitoring dissolved organic carbon by combining Landsat-8 and Sentinel-2 satellites: Case study in Saginaw River estuary, Lake Huron. *Science of The Total Environment*, 718, 137374.
- Costoya, X., Fernández-Nóvoa, D., deCastro, M., Santos, F., Lazure, P., & Gómez-Gesteira, M. (2016). Modulation of sea surface temperature warming in the Bay of Biscay by

- Loire and Gironde Rivers. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 121(1), 966–979.
- Cyr, F., Bourgault, D., Galbraith, P. S., & Gosselin, M. (2015). Turbulent nitrate fluxes in the Lower St. Lawrence Estuary, Canada. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 120(3), 2308–2330.
- Defoin-Platel, M., & Chami, M. (2007). How ambiguous is the inverse problem of ocean color in coastal waters? *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 112(C3).
- DFO. (2009). *Does eelgrass (Zostera marina) meet the criteria as an ecologically significant species?* (Tech. rep. No. 018). DFO.
- Dorji, P., & Fearn, P. (2016). A Quantitative Comparison of Total Suspended Sediment Algorithms: A Case Study of the Last Decade for MODIS and Landsat-Based Sensors. *Remote Sensing*, 8(10), 810.
- Doxaran, D., Cherukuru, R. C. N., & Lavender, S. J. (2005). Use of reflectance band ratios to estimate suspended and dissolved matter concentrations in estuarine waters. *International Journal of Remote Sensing*, 26(8), 1763–1769.
- Doxaran, D., Froidefond, J.-M., Lavender, S., & Castaing, P. (2002). Spectral signature of highly turbid waters Application with SPOT data to quantify suspended particulate matter concentrations. *Remote Sensing of Environment*, 13.
- Doxaran, D., Leymarie, E., Nechad, B., Dogliotti, A., Ruddick, K., Gernez, P., & Knaeps, E. (2016). Improved correction methods for field measurements of particulate light backscattering in turbid waters [Publisher: Optical Society of America]. *Optics Express*, 24(4), 3615–3637.
- Duarte, C. M. (1991). Seagrass depth limits. *Aquatic Botany*, 40(4), 363–377.
- Dvornikov, Y., Leibman, M., Heim, B., Bartsch, A., Herzschuh, U., Skorospekhova, T., Fedorova, I., Khomutov, A., Widhalm, B., Gubarkov, A., & Rößler, S. (2018). Terrestrial CDOM in Lakes of Yamal Peninsula: Connection to Lake and Lake Catchment Properties [Number: 2 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute]. *Remote Sensing*, 10(2), 167.
- El-Sabh, M. I., & Koutitonsky, V. G. (1977). An Oceanographic Study of James Bay before the Completion of the La Grande Hydroelectric Complex. *ARCTIC*, 30(3), 169–186.
- Ficek, D., Zapadka, T., & Dera, J. (2011). Remote sensing reflectance of Pomeranian lakes and the Baltic. *Oceanologia*, 53(4), 959–970.
- Fichot, C. G., & Benner, R. (2011). A novel method to estimate DOC concentrations from CDOM absorption coefficients in coastal waters. *Geophysical Research Letters*, 38(3).
- Fichot, C. G., & Benner, R. (2012). The spectral slope coefficient of chromophoric dissolved organic matter (S275–295) as a tracer of terrigenous dissolved organic carbon in river-influenced ocean margins. *Limnology and Oceanography*, 57(5), 1453–1466.
- Franz, B. A., Bailey, S. W., Kuring, N., & Werdell, P. J. (2015). Ocean color measurements with the Operational Land Imager on Landsat-8: implementation and evaluation in SeaDAS. *Journal of Applied Remote Sensing*, 9(1), 096070.

- Gitelson, A., Garbuзов, Г., Szilagyi, F., Mittenzwey, K.-H., Karnieli, A., & Kaiser, A. (1993). Quantitative remote sensing methods for real-time monitoring of inland waters quality. *International Journal of Remote Sensing*, 14(7), 1269–1295.
- Gordon, H. R., & Ding, K. (1992). Self-shading of in-water optical instruments. *Limnology and Oceanography*, 37(3), 491–500.
- Groom, S., Sathyendranath, S., Ban, Y., Bernard, S., Brewin, R., Brotas, V., Brockmann, C., Chauhan, P., Choi, J.-k., Chuprin, A., Ciavatta, S., Cipollini, P., Donlon, C., Franz, B., He, X., Hirata, T., Jackson, T., Kampel, M., Krasemann, H., ... Wang, M. (2019). Satellite Ocean Colour: Current Status and Future Perspective. *Frontiers in Marine Science*, 6, 485.
- Hooker, Morrow, & Matsuoka. (2013). Apparent optical properties of the Canadian Beaufort Sea – Part 2: The 1% and 1 cm perspective in deriving and validating AOP data products. *Biogeosciences*, 10(7), 4511–4527.
- Hooker, S. B., Matsuoka, A., Kudela, R. M., Yamashita, Y., Suzuki, K., & Houskeeper, H. F. (2020). A global end-member approach to derive $a_{CDOM}(440)$ from near-surface optical measurements [Publisher: Copernicus GmbH]. *Biogeosciences*, 17(2), 475–497.
- Houskeeper, H. F., Hooker, S. B., & Kudela, R. M. (2021). Spectral range within global $a_{CDOM}(440)$ algorithms for oceanic, coastal, and inland waters with application to airborne measurements. *Remote Sensing of Environment*, 253, 112155.
- Hovis, W. A., Clark, D. K., Anderson, F., Austin, R. W., Wilson, W. H., Baker, E. T., Ball, D., Gordon, H. R., Mueller, J. L., El-Sayed, S. Z., Sturm, B., Wrigley, R. C., & Yentsch, C. S. (1980). Nimbus-7 Coastal Zone Color Scanner: System Description and Initial Imagery. *Science*, 210(4465), 60–63.
- Hudon, C., Gagnon, P., Rondeau, M., Hébert, S., Gilbert, D., Hill, B., Patoine, M., & Starr, M. (2017). Hydrological and biological processes modulate carbon, nitrogen and phosphorus flux from the St. Lawrence River to its estuary (Quebec, Canada). *Biogeochemistry*, 135(3), 251–276.
- IOCCG. (2018). Ocean Optics and Biogeochemistry Protocols for Satellite Ocean Colour Sensor Validation; Volume 1.0. Inherent Optical Property Measurements and Protocols: Absorption Coefficient. [Medium: 78pp. Publisher: International Ocean Colour Coordinating Group (IOCCG)].
- Jerlov, N. G. (1976). *Marine optics*. Elsevier Scientific Pub. Co
First ed. published in 1968 under title: Optical oceanography Includes index.
- Keukelaere, L. D., Sterckx, S., Adriaensen, S., Knaeps, E., Reusen, I., Giardino, C., Bresciani, M., Hunter, P., Neil, C., Zande, D. V. d., & Vaiciute, D. (2018). Atmospheric correction of Landsat-8/OLI and Sentinel-2/MSI data using iCOR algorithm: validation for coastal and inland waters. *European Journal of Remote Sensing*, 51(1), 525–542.
- Kowalcuk, P., A. Stedmon, C., & Markager, S. (2006). Modeling absorption by CDOM in the Baltic Sea from season, salinity and chlorophyll. *Marine Chemistry*, 101(1), 1–11.
- Kratzer, S., & Moore, G. (2018). Inherent Optical Properties of the Baltic Sea in Comparison to Other Seas and Oceans. *Remote Sensing*, 10(3), 418.

- Kutser, T., Paavel, B., Verpoorter, C., Kauer, T., & Vahtmäe, E. (2012). Remote sensing of water quality in optically complex lakes. *The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, XXXIX-B8*, 165–169.
- Kutser, T., Pierson, D. C., Tranvik, L., Reinart, A., Sobek, S., & Kallio, K. (2005). Using Satellite Remote Sensing to Estimate the Colored Dissolved Organic Matter Absorption Coefficient in Lakes. *Ecosystems*, 8(6), 709–720 read.
- Lalumière, R., Messier, D., Fournier, J. J., & Peter McRoy, C. (1994). Eelgrass meadows in a low arctic environment, the northeast coast of James Bay, Québec. *Aquatic Botany*, 47(3-4), 303–315.
- Larouche, P., & Boyer-Villemaire, U. (2010). Suspended particulate matter in the St. Lawrence estuary and Gulf surface layer and development of a remote sensing algorithm. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 90(4), 241–249.
- Le Fouest, V., Zakardjian, B., Saucier, F. J., & Çizmeli, S. A. (2006). Application of SeaWiFS- and AVHRR-derived data for mesoscale and regional validation of a 3-D high-resolution physical–biological model of the Gulf of St. Lawrence (Canada). *Journal of Marine Systems*, 60(1), 30–50.
- Li, P., Ke, Y., Bai, J., Zhang, S., Chen, M., & Zhou, D. (2019). Spatiotemporal dynamics of suspended particulate matter in the Yellow River Estuary, China during the past two decades based on time-series Landsat and Sentinel-2 data. *Marine Pollution Bulletin*, 149, 110518.
- Manson, G. K. (2005). ON THE COASTAL POPULATIONS OF CANADA AND THE WORLD, 11.
- Matthews, M. W. (2011). A current review of empirical procedures of remote sensing in inland and near-coastal transitional waters. *International Journal of Remote Sensing*, 32(21), 6855–6899.
- McClain, C. R. (2009). A Decade of Satellite Ocean Color Observations. *Annual Review of Marine Science*, 1(1), 19–42.
- Mei, Z.-P., Saucier, F. J., Le Fouest, V., Zakardjian, B., Sennville, S., Xie, H., & Starr, M. (2010). Modeling the timing of spring phytoplankton bloom and biological production of the Gulf of St. Lawrence (Canada): Effects of colored dissolved organic matter and temperature. *Continental Shelf Research*, 30(19), 2027–2042.
- Menken, K. D., Brezonik, P. L., & Bauer, M. E. (2006). Influence of Chlorophyll and Colored Dissolved Organic Matter (CDOM) on Lake Reflectance Spectra: Implications for Measuring Lake Properties by Remote Sensing. *Lake and Reservoir Management*, 22(3), 179–190.
- Mobley, C. D. (1994). *Light and Water radiative transfer in natural waters*.
- Mohammadpour, G. (2016). *Remote sensing of suspended particulate matter concentration in the St. Lawrence Estuary* (Doctoral dissertation). UQAR-ISMER.
- Mohammadpour, G., Gagné, J.-P., Larouche, P., & Montes-Hugo, M. A. (2017). Optical properties of size fractions of suspended particulate matter in littoral waters of Québec. *Biogeosciences*, 14(23), 5297–5312.

- Mohammadpour, G., Montes-Hugo, M. A., Stavn, R., Gagné, J.-P., & Larouche, P. (2015). Particle Composition Effects on MERIS-Derived SPM: A Case Study in the Saint Lawrence Estuary. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 41(6), 515–524.
- Montes-Hugo, M., Roy, S., Gagne, J. P., Demers, S., Cizmeli, S., & Mas, S. (2012). Ocean colour and distribution of suspended particulates in the St. Lawrence Estuary. [type: dataset].
- Montes-Hugo, M. A., & Mohammadpour, G. (2012). Biogeo-optical modeling of SPM in the St. Lawrence Estuary. 38(2), 14.
- Montes-Hugo, M. A., & Mohammadpour, G. (2013). Satellite-derived suspended particulates in the Saint Lawrence Estuary: uncertainties due to bottom effects. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 39(5), 444–454.
- Morrow, J. H., Booth, C. R., & Lind, R. N. (2010). The Compact-Optical Profiling System (C-OPS), 16.
- Mueller, J. L., Fargion, G. S., McClain, C. R., Mueller, J. L., Bidigare, R. R., Trees, C., Balch, W. M., Dore, J., Drapeau, D. T., Karl, D., Van, L., & Authors, J. P. (2003). Ocean Optics Protocols For Satellite Ocean Color Sensor Validation, Revision 5, Volume V: 5, 43.
- Murphy, G. E., Dunic, J. C., Adamczyk, E. M., Bittick, S. J., Côté, I. M., Cristiani, J., Geissinger, E. A., Gregory, R. S., Lotze, H. K., O'Connor, M. I., Araújo, C. A., Rubidge, E. M., Templeman, N. D., & Wong, M. C. (2021). From coast to coast to coast: ecology and management of seagrass ecosystems across Canada (D. E. Schindler, Ed.). *FACETS*, 6(1), 139–179.
- Nechad, B., Ruddick, K., & Park, Y. (2010). Calibration and validation of a generic multisensor algorithm for mapping of total suspended matter in turbid waters. *Remote Sensing of Environment*, 114(4), 854–866.
- Neukermans, G., Loisel, H., Mériaux, X., Astoreca, R., & McKee, D. (2012). In situ variability of mass-specific beam attenuation and backscattering of marine particles with respect to particle size, density, and composition. *Limnology and Oceanography*, 57(1), 124–144.
- Neukermans, G., Loisel, H., Mériaux, X., Astoreca, R., & McKee, D. (2012). In situ variability of mass-specific beam attenuation and backscattering of marine particles with respect to particle size , density , and composition. *Limnology and Oceanography*, 57(1), 124–144.
- Neukermans, G., Ruddick, K., Loisel, H., & Roose, P. (2012). Optimization and quality control of suspended particulate matter concentration measurement using turbidity measurements: Optimizing [SPM] Measurement. *Limnology and Oceanography: Methods*, 10(12), 1011–1023.
- Normandin, C., Lubac, B., Sottolichio, A., Frappart, F., Ygorra, B., & Marieu, V. (2019). Analysis of Suspended Sediment Variability in a Large Highly Turbid Estuary Using a 5-Year-Long Remotely Sensed Data Archive at High Resolution. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 124(11), 7661–7682.

- Odermatt, D., Gitelson, A., Brando, V. E., & Schaepman, M. (2012). Review of constituent retrieval in optically deep and complex waters from satellite imagery. *Remote Sensing of Environment*, 118, 116–126.
- Olson, D. (1988). Multidisciplinary Issues in Marine Science. *Oceanography*, 1(2), 42–43.
- Osadchiev, A., & Sedakov, R. (2019). Spreading dynamics of small river plumes off the north-eastern coast of the Black Sea observed by Landsat 8 and Sentinel-2. *Remote Sensing of Environment*, 221, 522–533.
- Pahlevan, N., Sarkar, S., Franz, B. A., Balasubramanian, S. V., & He, J. (2017). Sentinel-2 MultiSpectral Instrument (MSI) data processing for aquatic science applications: Demonstrations and validations. *Remote Sensing of Environment*, 201(August), 47–56.
- Pahlevan, N., Mangin, A., Balasubramanian, S. V., Smith, B., Alikas, K., Arai, K., Barbosa, C., Bélanger, S., Binding, C., Bresciani, M., Giardino, C., Gurlin, D., Fan, Y., Harmel, T., Hunter, P., Ishikaza, J., Kratzer, S., Lehmann, M. K., Ligi, M., ... Warren, M. (2021). ACIX-Aqua: A global assessment of atmospheric correction methods for Landsat-8 and Sentinel-2 over lakes, rivers, and coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 258, 112366.
- Priorities for Coastal Ecosystem Science* [Pages: 4932]. (1994). National Academies Press.
- Reynolds, R. A., Stramski, D., & Neukermans, G. (2016). Optical backscattering by particles in Arctic seawater and relationships to particle mass concentration, size distribution, and bulk composition. *Limnology and Oceanography*, 61(5), 1869–1890.
- Ricketts, P., & Harrison, P. (2007). Coastal and Ocean Management in Canada: Moving into the 21st Century. *Coastal Management*, 35(1), 5–22.
- Saucier, F. J., Roy, F., Gilbert, D., Pellerin, P., & Ritchie, H. (2003). Modeling the formation and circulation processes of water masses and sea ice in the Gulf of St. Lawrence, Canada. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 108(C8).
- Seegers, B. N., Stumpf, R. P., Schaeffer, B. A., Loftin, K. A., & Werdell, P. J. (2018). Performance metrics for the assessment of satellite data products: an ocean color case study. *Optics Express*, 26(6), 7404.
- Shaw, J.-L. (2019). *Hydrodynamique de la baie de Sept-Îles*. UQAR.
- Sigman, D. M., & Hain, M. P. (2012). The Biological Productivity of the Ocean. 3(6), 17.
- Singh, R. K., Shanmugam, P., He, X., & Schroeder, T. (2019). UV-NIR approach with non-zero water-leaving radiance approximation for atmospheric correction of satellite imagery in inland and coastal zones. *Optics Express*, 27(16), A1118.
- Social and environmental impacts of the James Bay Hydroelectric Project*. (1999). Montreal : McGill-Queen's University Press.
- Stramski, D., Boss, E., Bogucki, D., & Voss, K. J. (2004). The role of seawater constituents in light backscattering in the ocean. *Progress in Oceanography*, 61(1), 27–56.
- Tavora, J., Boss, E., Doxaran, D., & Hill, P. (2020). An Algorithm to Estimate Suspended Particulate Matter Concentrations and Associated Uncertainties from Remote Sensing Reflectance in Coastal Environments [Number: 13 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute]. *Remote Sensing*, 12(13), 2172.

- Therriault, J.-C., & Lacroix, G. (1976). Nutrients, Chlorophyll, and Internal Tides in the St. Lawrence Estuary, 11.
- van der Molen, J., Ruardij, P., & Greenwood, N. (2017). A 3D SPM model for biogeochemical modelling, with application to the northwest European continental shelf. *Journal of Sea Research*, 127, 63–81.
- Vanhellemont, Q. (2019a). Adaptation of the dark spectrum fitting atmospheric correction for aquatic applications of the Landsat and Sentinel-2 archives. *Remote Sensing of Environment*, 225, 175–192.
- Vanhellemont, Q. (2019b). Daily metre-scale mapping of water turbidity using CubeSat imagery [Publisher: Optical Society of America]. *Optics Express*, 27(20), A1372–A1399.
- Vanhellemont, Q. (2020). Sensitivity analysis of the dark spectrum fitting atmospheric correction for metre- and decametre-scale satellite imagery using autonomous hyperspectral radiometry [Publisher: Optical Society of America]. *Optics Express*, 28(20), 29948–29965.
- Vanhellemont, Q., & Ruddick, K. (2014). Turbid wakes associated with offshore wind turbines observed with Landsat 8. *Remote Sensing of Environment*, 145, 105–115.
- Vanhellemont, Q., & Ruddick, K. (2018). Atmospheric correction of metre-scale optical satellite data for inland and coastal water applications. *Remote Sensing of Environment*, 216, 586–597.
- Vanhellemont, Q., & Ruddick, K. (2021). Atmospheric correction of Sentinel-3/OLCI data for mapping of suspended particulate matter and chlorophyll-a concentration in Belgian turbid coastal waters. *Remote Sensing of Environment*, 256, 112284.
- Zaucha, J., & Gee, K. (Eds.). (2019). *Maritime Spatial Planning: past, present, future*. Springer International Publishing.
- Zhang, X., Huot, Y., Gray, D. J., Weidemann, A., & Rhea, W. J. (2013). Biogeochemical origins of particles obtained from the inversion of the volume scattering function and spectral absorption in coastal waters. *Biogeosciences*, 10(9), 6029–6043.
- Zhang, & Xie. (2015). Photomineralization and photomethanification of dissolved organic matter in Saguenay River surface water [Publisher: Copernicus GmbH]. *Biogeosciences*, 12(22), 6823–6836.
- Zhang, Y., Zhou, L., Zhou, Y., Zhang, L., Yao, X., Shi, K., Jeppesen, E., Yu, Q., & Zhu, W. (2021). Chromophoric dissolved organic matter in inland waters: Present knowledge and future challenges. *Science of The Total Environment*, 759, 143550.
- Zheng, G., & DiGiacomo, P. M. (2017). Uncertainties and applications of satellite-derived coastal water quality products. *Progress in Oceanography*, 159, 45–72.
- Zhu, W., Yu, Q., Tian, Y. Q., Becker, B. L., Zheng, T., & Carrick, H. J. (2014). An assessment of remote sensing algorithms for colored dissolved organic matter in complex freshwater environments. *Remote Sensing of Environment*, 140, 766–778.
- Zibordi, & Ferrari. (1995). Instrument self-shading in underwater optical measurements: experimental data. *Applied Optics*, 34(15), 2750.