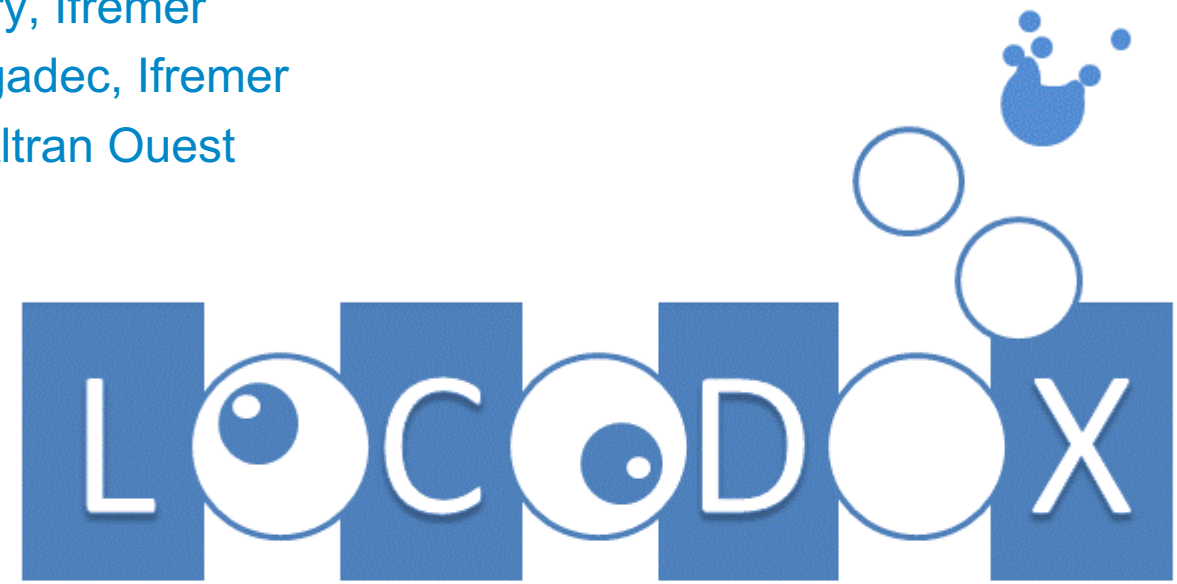
Paris, 11/12/2017

LOCODOX :
un outil matlab pour corriger les données Argo-Oxygène

Emilie Brion, Altran Ouest
Virginie Thierry, Ifremer
Catherine Lagadec, Ifremer
Anne Piron, Altran Ouest



Argo Oxygène

- Mesures réalisée par des optodes aanderaa ou seabird
- 3 paramètres utiles :
  - Concentration d'oxygène dissous : DOXY (µmol/kg)
  - Pourcentage de saturation PSAT (%)
  - Pression partielle d'oxygène : PPOX (mBar)

Optode aanderaa

Présentation de Locodox

LOCODOX est un outil **MATLAB** qui permet de corriger les données d'Oxygène selon 3 méthodes :

- ***WOA*** : utilisant les données climatologiques (WOA09 (atlas winkler, mL/L))
- ***REF*** : utilisant des données In-Situ de référence : CTD réalisée au déploiement, par exemple
- ***INAIR*** : utilisant la mesure dans l'air effectuée par le flotteur

LOCODOX produit les fichiers **NetCDF argo 3.1** mis à jour des données corrigées et des métadata

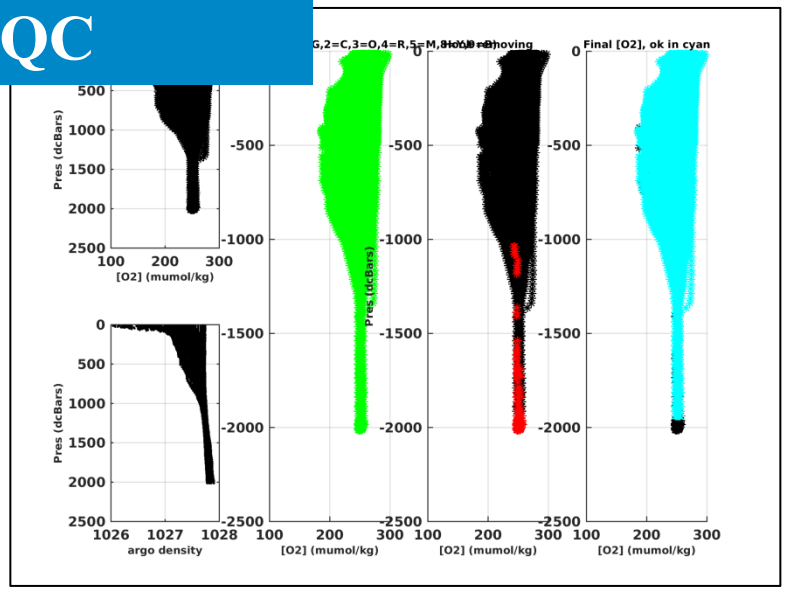
Takeshita et al, 2013

Bittig et Kortzinger, 2015

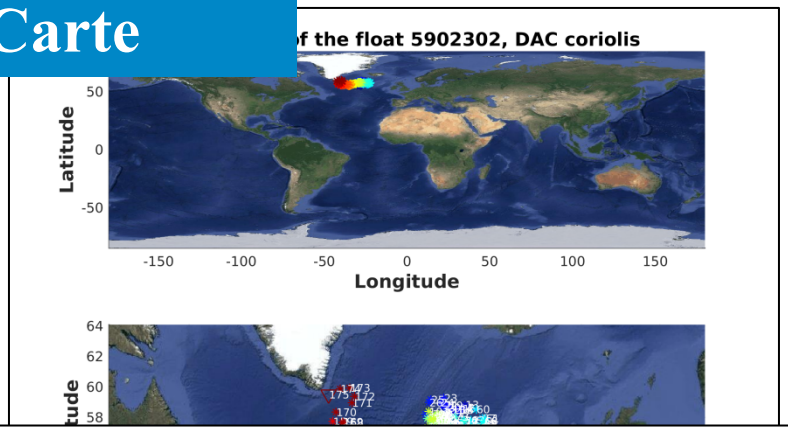
LOCODOX

A quoi çà ressemble

QC

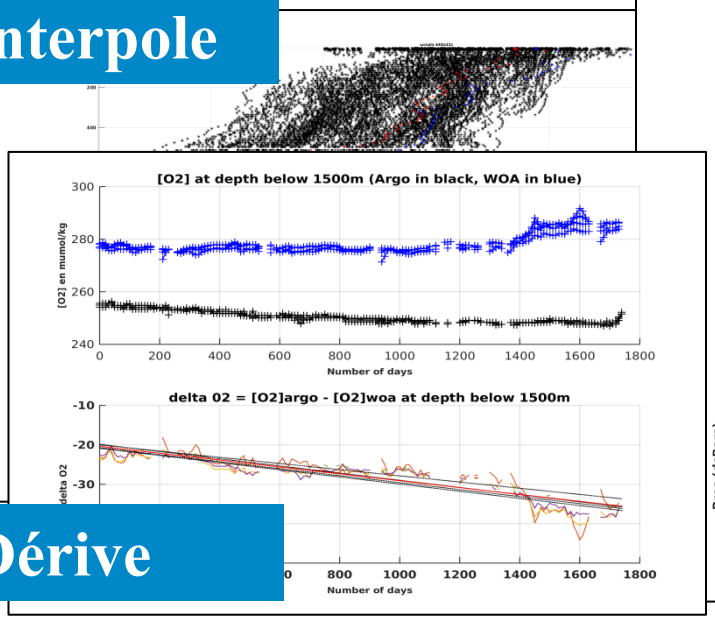


Carte



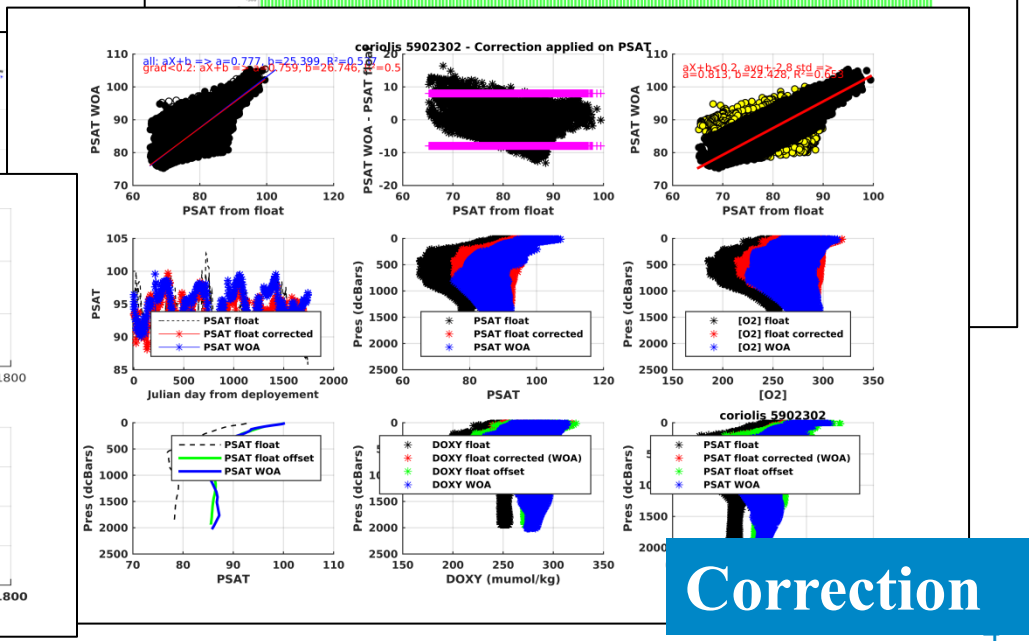
QC cycle

Interpole



Dérive

Correction



Données

Format NetCDF argo 3.1 :

- Fichiers « core » : Pression, Température, Salinité (PTS) de la CTD
- Fichiers « bio » : paramètres biogéochimiques (dont oxygène), pression (il peut y avoir autant de profils de pression que de paramètres, selon l'échantillonage effectué), température (qui peut être celle associée au capteur « bio »)
- Fichiers « profiles »: l'ensemble des mesures de profils (ascendant et descendant)
- Fichiers « trajectory » : les informations temporelles (timing lors du cycle du flotteur), mesures datées de la dérive en profondeur, du profil et en surface, localisation argos.

Plus d'infos : Argo User's Manual, disponible sur le site web de l'Argo Data Management (http://www.argodatamgt.org/Documentation)

Données

Fichiers « monoprofile »

- DOXY, PTS (Pression de l'optode si elle existe, température de l'optode si elle existe, …)
- Profils pompés et non pompés : « vertical sampling scheme »

Fichiers « trajectory »

- PPOX, PT (température de l'optode si elle existe).
- Pour colocalisation avec données de référence NCEP :
  - Ascent End Time : timing associé à la mesure PPOX si on n'a pas de mesure datée par ailleurs
  - Localisation argos (la première disponible)

Méthodo

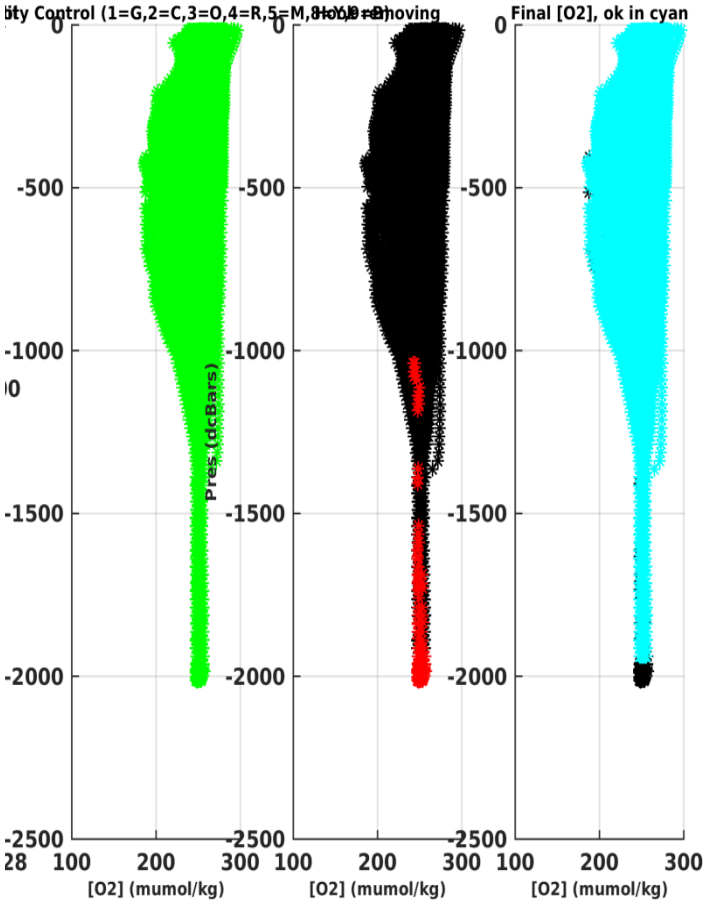
READ	• Profiles, Traj • Climato, InSitu Référence, atmospheric data
QC	• Hook removal • Select QC, according to the configuration file
PREPARE	• Data drift corrected if needed • Reference data interpolated on argo levels and track
COMPUTE CORRECTION	• Correction with WOA, REF, IN AIR • Compute correction on ascendant profiles
APPLY	• Apply to both ascendant and descendant profiles • Apply to all the profiles of the vertical sampling scheme
Write NetCDF	• Scientific calibration fields and history fields updated (Argo Quality Control Manual for BioGeoChemical Data).

Méthodo

Fichier de configuration :

- Choix des QC retenus pour calculer la correction, par paramètre (P, T, S, O)
- Possibilité de ne pas prendre en compte une sélection de point définie par l'utilisateur
- Choix du data mode : forcer à prendre le temps réel. Par défaut, on prend le DM puis le RM.
- Choix du Measurement_Code correspondant aux mesures dans l'air. Par défaut actuellement : MC = 1090 => *EN COURS DE DISCUTION*
- Choix de la valeur seuil en dessous duquel la correction linéaire est considéré comme non fiable (coeff. de régression)
- Choix de la valeur de l'erreur finale sur le champ adjusted (erreur brute, erreur relative, et valeurs)

Contrôle Qualité : Hook



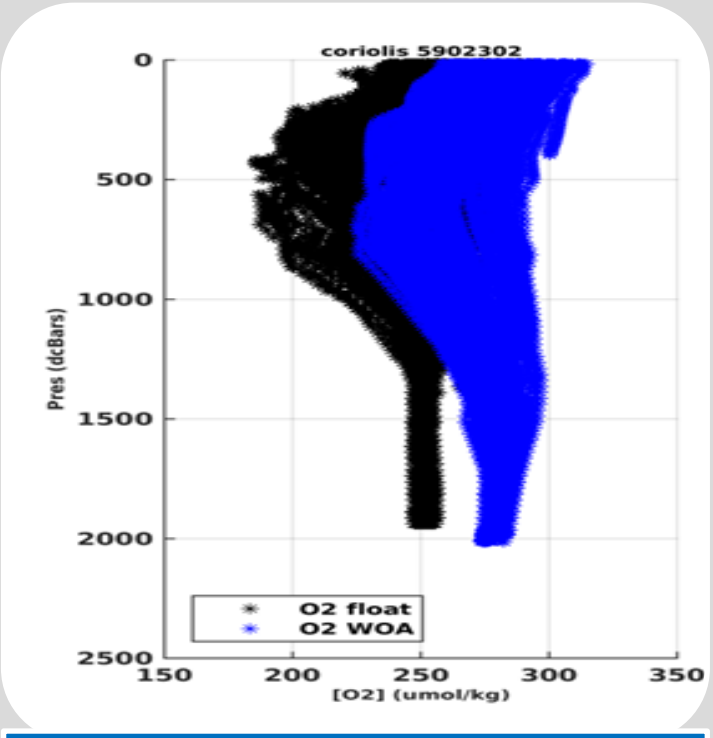
Hook removal : basé sur le constat que beaucoup de profils ont un décrochage de DOXY (baisse) en profondeur sur environ 50m.

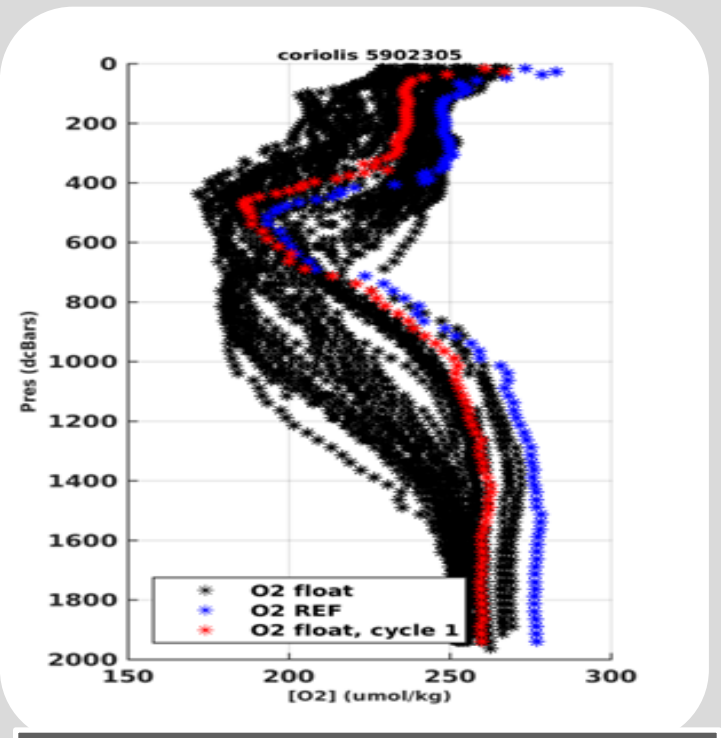
LOCODOX propose à l'utilisateur d'enlever les données suspectes en queue de profil. Le choix s'applique à tous les profils, selon le critère suivant :

- ✓ si la profondeur max est < 840 => [QC = 4, data = NaN] sur les 50m les plus profonds

Les données retenues pour la correction sont celles dont le QC est défini par l'utilisateur (cas général : QC = [1,2])

Interpolation





Correction avec WOA

interpolation de WOA sur la trace du flotteur + interpolation sur les niveaux argo

Correction avec REF

interpolation de la données CTD de référence sur les niveaux Argo du cycle du flotteur accouplé à la donnée CTD.

Correction de dérive

LOCODOX estime la dérive temporelle de l'optode par régression linéaire entre la série temporelle argo et la série temporelle de référence :

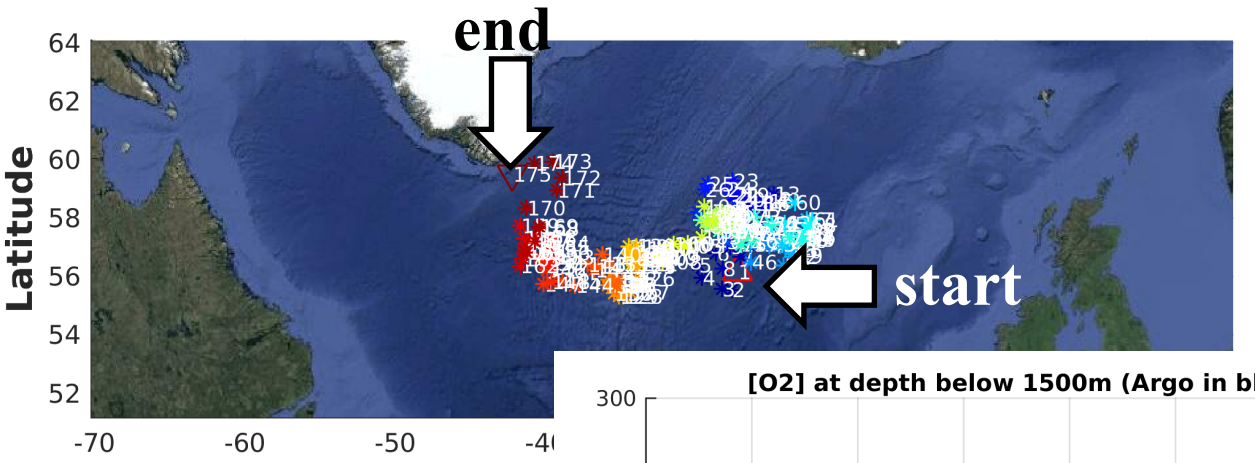
- WOA : 1500 derniers m du flotteur, interpolés tous les 100m + WOA09 interpolée sur ces mêmes niveaux
- INAIR : mesure dans l'air + données NCEP

LOCODOX fournit des critères d'aide à la décision : on suggère de ne pas appliquer de correction de dérive si :

- série < 1 an
- Moins de 10 profils de profondeurs > 1500m
- Dérive très faible (-1,5 < pente < 1,5)

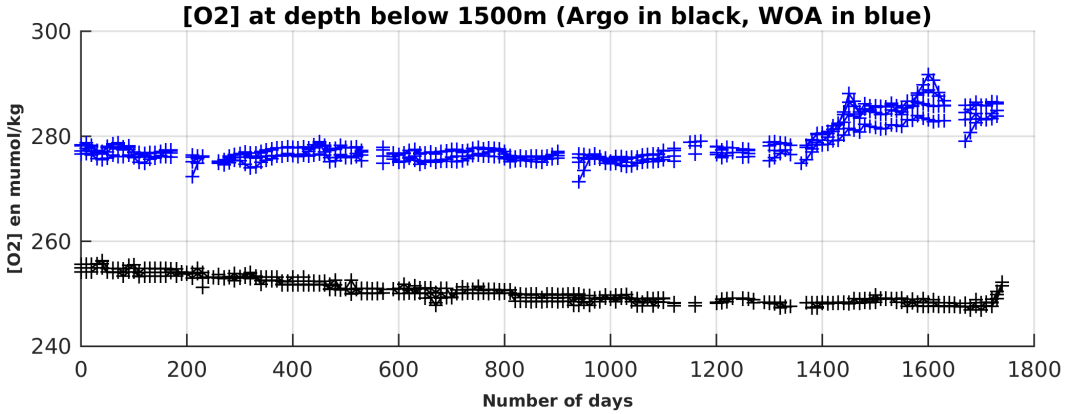
=> Dernier mot à l'opérateur

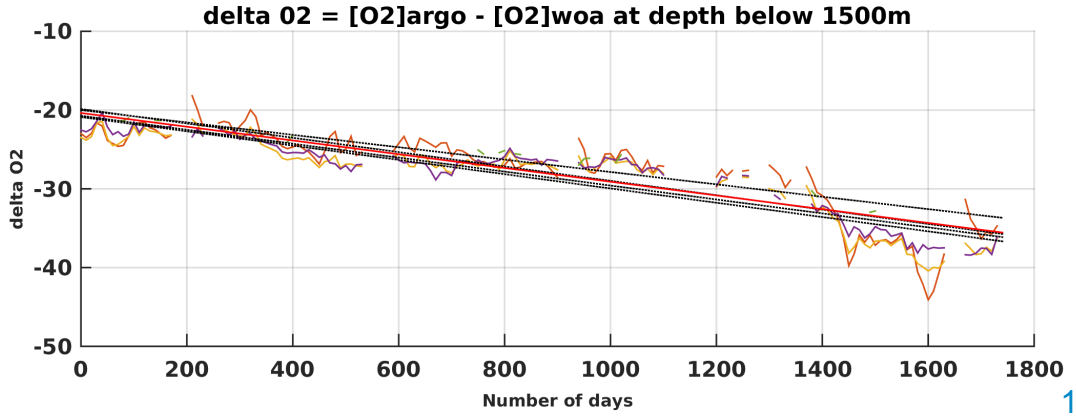
Correction de dérive



- Argo vs WOA
- Presque 5 ans de données
- Drift : -3,1841 umol/kg

=> Malgré tout, on applique pas la correction de dérive



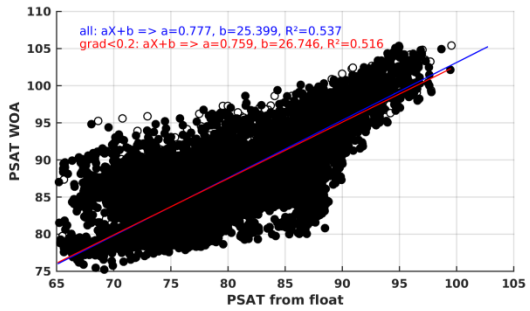


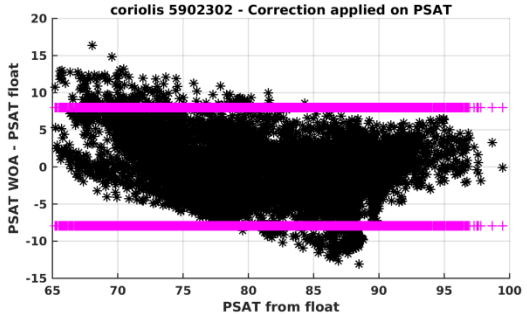
Correction avec WOA09 ou REF

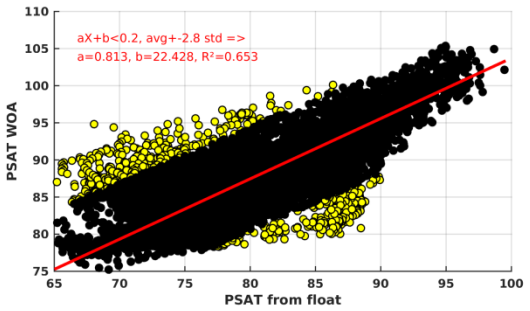
Basée sur la méthode de Takeshita, 2013

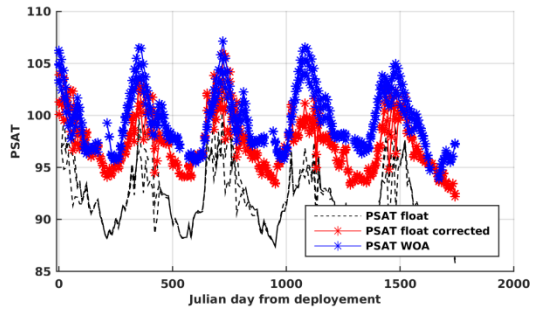
Données argo	• données non-pompées (Primary sampling ou Secondary sampling dans le Vertical Sampling Scheme) • profils ascendants
WOA ou CTD de référence	• interpolées sur niveaux argo
Sélection des données valides pour la régression (argo et référence)	• Gradient dDOXY/dz < 0,2 sur argo et la référence • Elimination des données « argo – référence » trop différentes (basé sur moyenne +/- 2,8 std, itérations)
Régression linéaire entre ARGO et la référence choisie (WOA09 ou REF)	• $O2_{corr} = C_1 \times O2_{argo} + C_0$ • Si R2 < 0.8, correction constante (offset = moyenne de la diff des moyennes) : $O2_{corr} = O2_{argo} + offset$
Application	• Profils descendants et ascendants • Données pompées et non pompées (tous les profils du vertical sampling scheme)

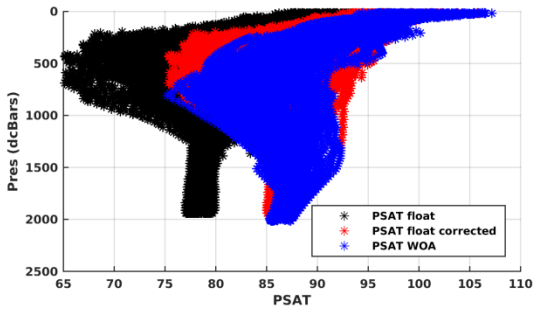
Correction avec WOA09 ou REF

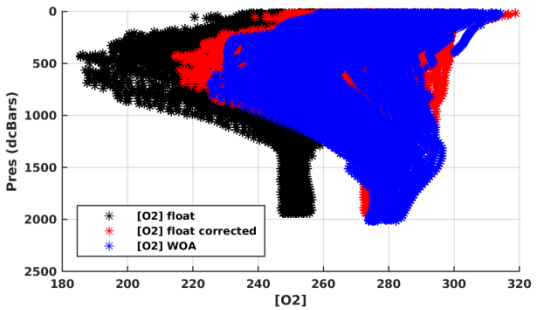


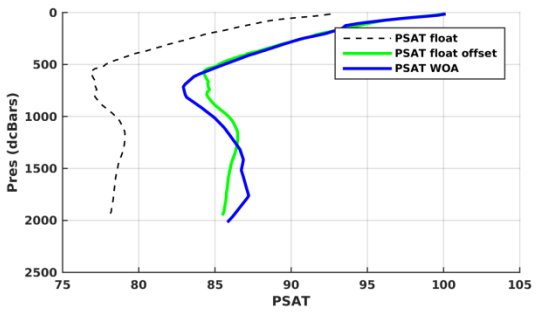


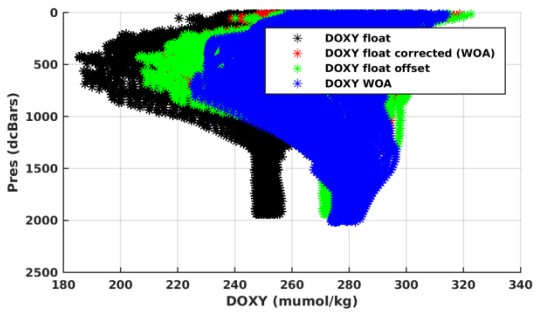


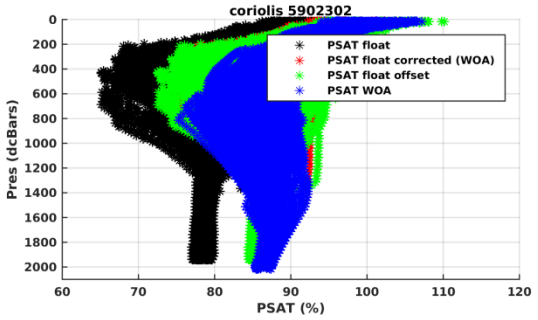












Correction : Mesure dans l'air

Basée sur la méthode de Bittig and Kortzinger, 2015

Données

- PO2 NCEP (réanalyses atmosphériques)
- PO2 Optode mesure dans l'air et dans l'eau : données « ***trajectoire*** » (PPOX) : distinction air/eau non triviale, en particulier pour flotteur avec mesure « near-surface ».

Régression entre 3 paramètres

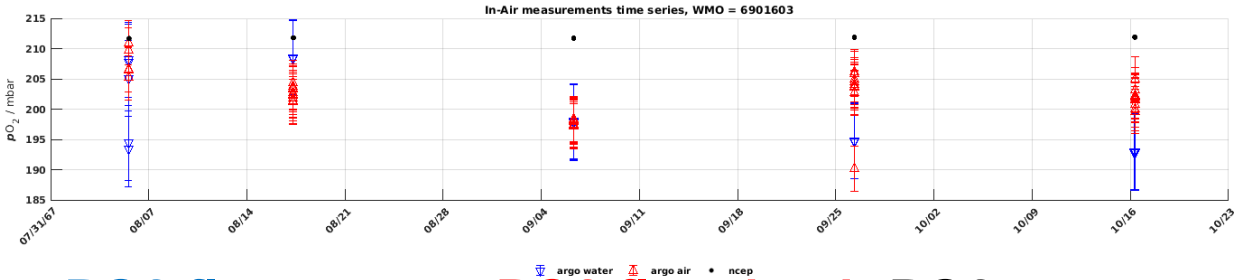
- Permet d'enlever le biais lié à la submersion occasionnelle de l'optode lors de la mesure dans l'air (mesure contaminée par PO2 eau) (c : facteur de submersion, m : correction)
- $$pO_{2(air,obs)} = c \times pO_{2(water,obs)} + \left(\frac{1-c}{m}\right) p0_{2(air,ncep)}$$

Correction : La valeur brute est corrigé du facteur m

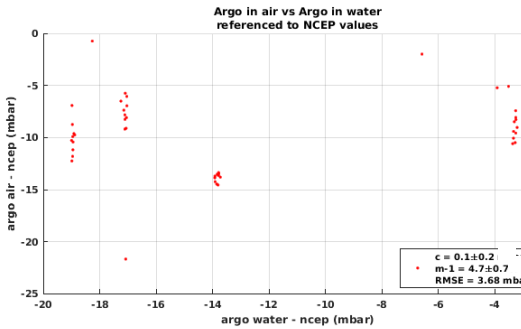
- $$pO_{2(obs)}corrected = m \times pO_{2(obs)}$$
- Application aux données pompées et non pompées (tout profil du vertical samping scheme)
- Application aux profils ascendants et descendants

CODOX

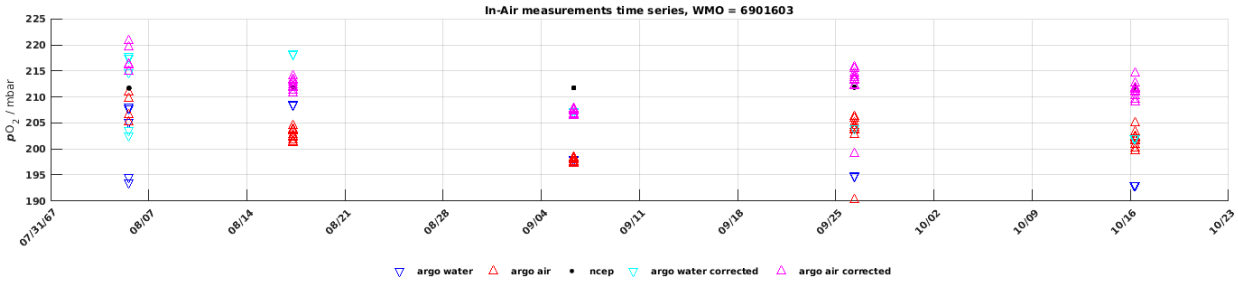
Correction : Mesure dans l'air



PO2 float water **PO2 float in-air** **PO2 ncep**



m = 2.6



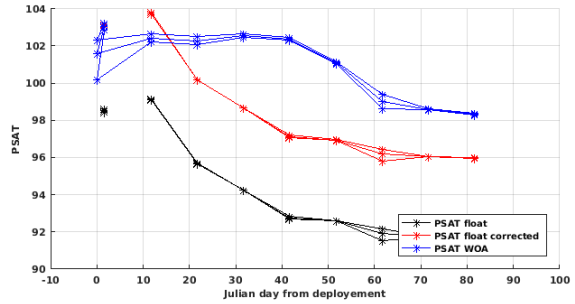
Equation:
PO2_inair ~ c*PO2_inwater + (1-c/m)PO2_ncep

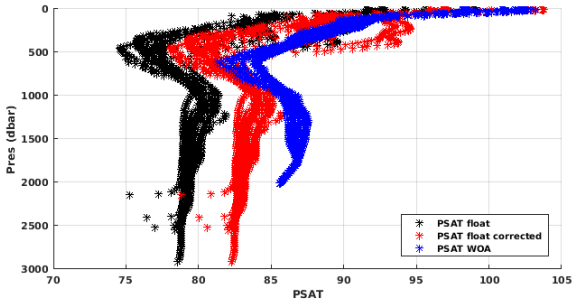
Coefficients:
m-1 = 4.69 +/- 0.72
c = 0.09 +/- 0.18

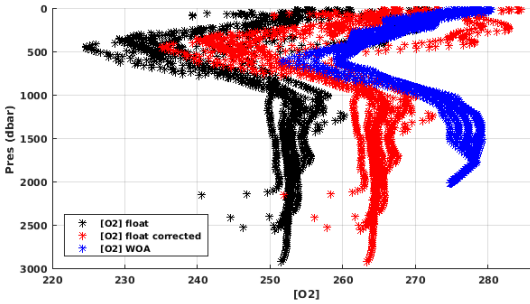
Stats:
m-1 pValues = 3.08e-01
c pValues = 1.22e-16
Number of obs : 45
RMSE : 3.677
R-Squared : 0.023
Adjusted R-Squared : 0.001

PO2 float water corrected **PO2 float in-air corrected**

R2 = 4%







PSAT float raw **PSAT float corrected** **PSAT WOA**

Correction : Mesure dans l'air

Distinction des mesures dans l'eau et dans l'air

Actuellement, LOCODOX traite les flotteurs avec mesures juste avant émergence (« in water ») et juste après émergence (« in air ») :

- Pas de distinction sur le MC (1090 pour les deux)
- Les paramètres d'échantillonnages sont exactement les mêmes pour les deux phases d'acquisition => même nombre de mesures pour chacune des phases (en théorie), toutes les mesures sont datées.

⇒ on choisit le premier lot comme étant les mesures « in water », et le deuxième lot comme étant « in air ».

Si on n'a pas toutes les mesures datées, alors on considère que toutes les mesures MC = 1090 sont dans l'air. On prend les mesures du profil non-pompé comme mesures dans l'eau.

Correction : Mesure dans l'air

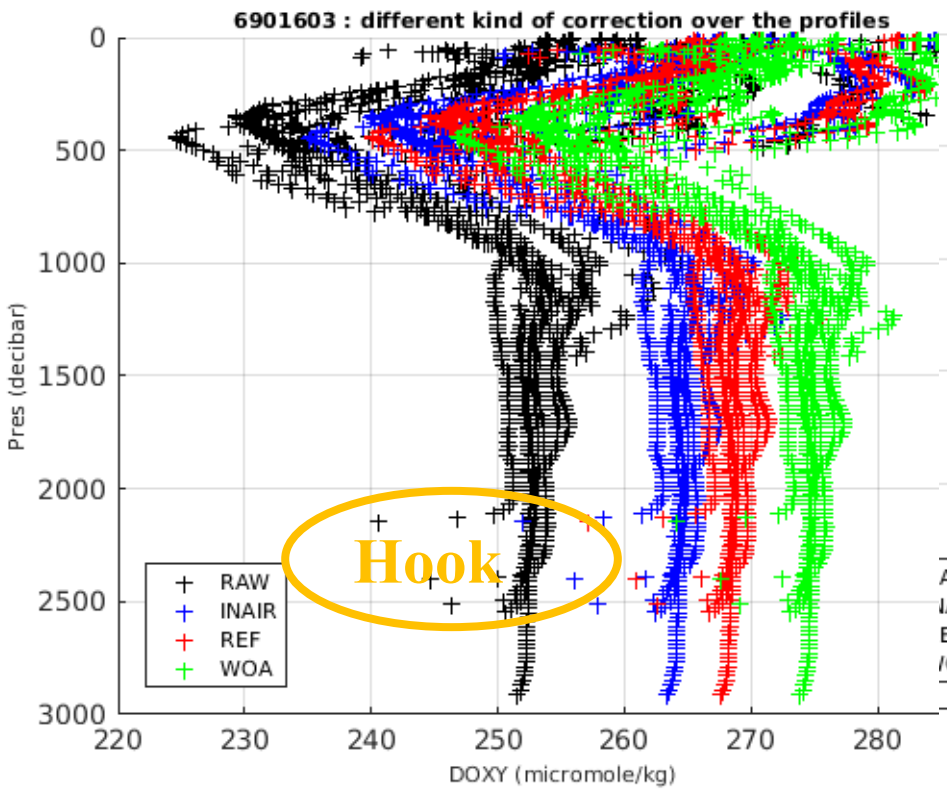
Distinction des mesures dans l'eau et dans l'air

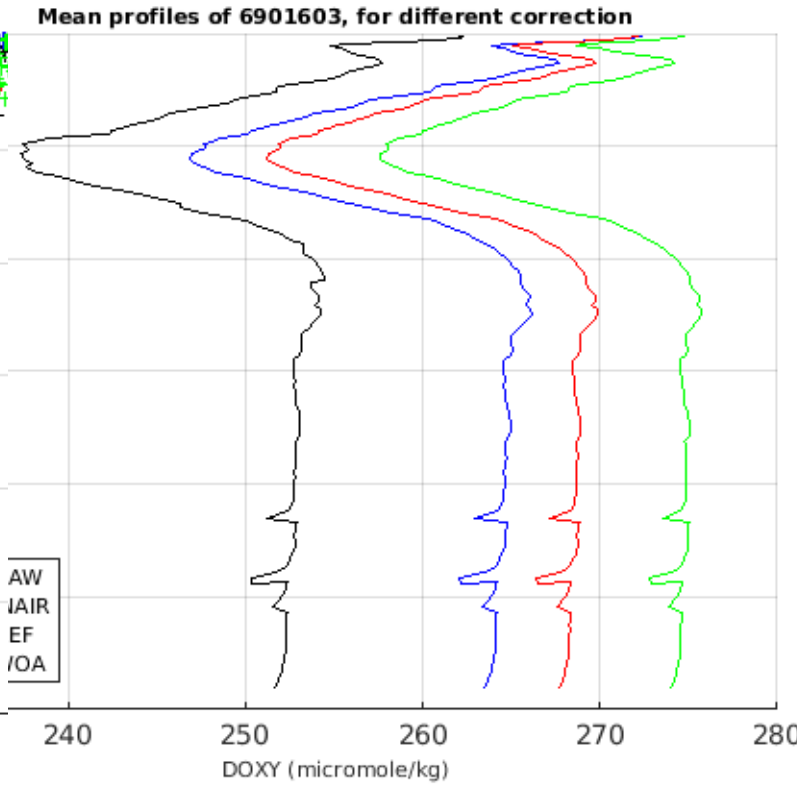
- On peut avoir des flotteurs avec phase near-surface + phase surface inflated/deflated (NAVIS) => non traité
- **Dernières discussions** : le ***MC pourrait changer*** selon le type de flotteur, en respectant la règle « en transition vers » (par exemple vers TST : MC = 700). LOCODOX permet de choisir le MC que l'on veut, dans le fichier de configuration. Cependant, il n'est pas conçus pour prendre différents MC pour le moment (par exemple, le MC=680 pour la phase near-surface, et MC = 670 pour la phase « in-air »).

Comparaison (ex: 6901603)

45°W – 57°N, une dizaine de cycles

Profils moyens





Raw data - REF corr data - INAIR corr data - WOA corr data

Fichiers NetCDF output

Output : données au format **NetCDF argo 3.1**

- **mise à jour des champs « DOXY_adjusted » :** DOXY_adjusted, DOXY_adjusted_qc,, DOXY_adjusted_error
- **mise à jour des champs de métadonnées :** date_update, data_moded, data_state_indicator, parameter_data_mode, history fields, scientific calib fields

Plus d'infos : Argo Quality Control Manual For BioGeoChemical data, disponible sur le site web de l'Argo Data Management (http://www.argodatamgt.org/Documentation)

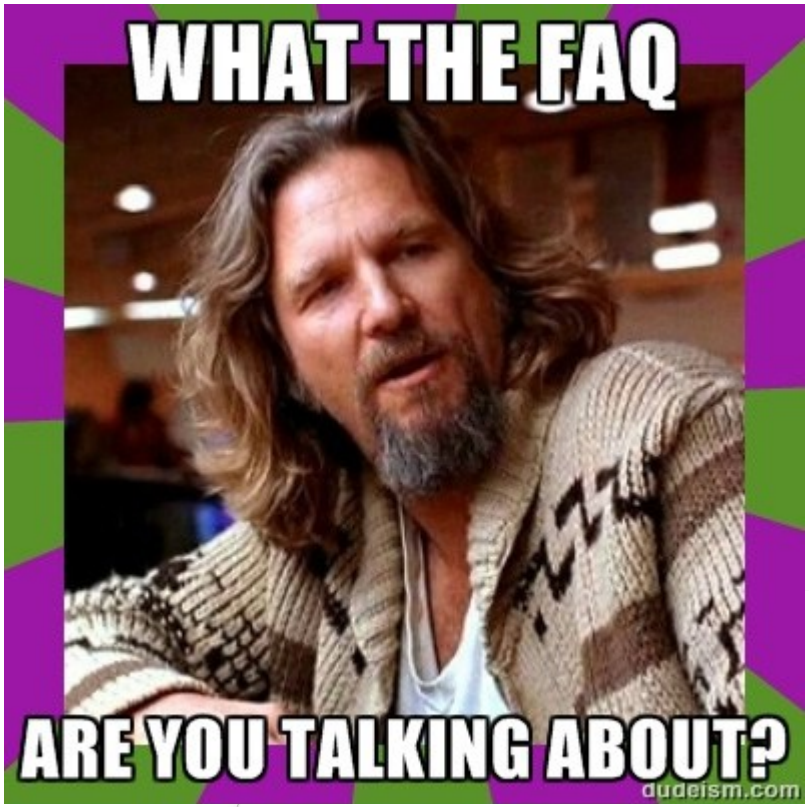
Conclusion

LOCODOX take it easy !

- Fichiers input NetCDF argo 3.1
- 3 méthodes de correction
- Fichiers output NetCDF argo 3.1, mis à jour selon les dernières recommandations, diffusables pour les DAC
- Facile d'utilisation, avec un fichier de configuration

Warnings !

- Format NetCDF 3.1 en cours d'évolution : MC pour mesure dans l'air…
- Correction INAIR pas encore adaptée à tous les cas
- Correction REF : Base de donnée de référence dispo pour Atlantique, à mettre à jour par l'utilisateur
- MATLAB + **statistic Toolbox**



Merci pour votre attention

Si vous avez des questions ?

REFERENCES

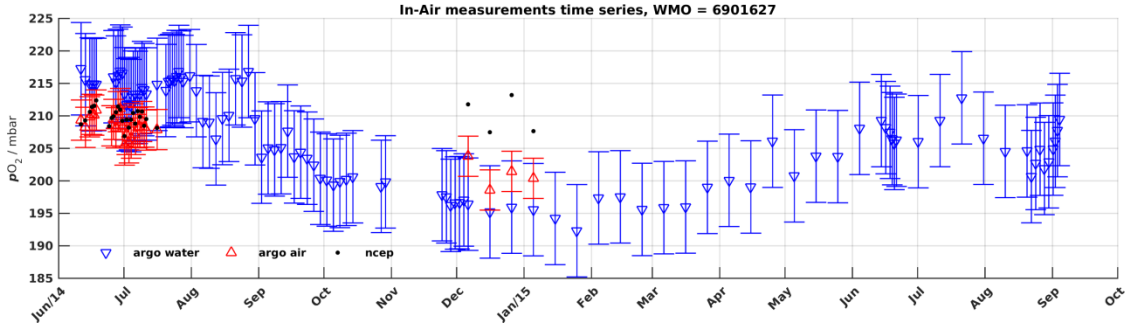
Takeshita et al, 2013: A climatology-based quality control procedure for profiling float oxygen data: Qc Procedure for Profiling Float Oxygen, *J. Geophys. Res. Oceans*, 118, 5640–5650, doi:10.1002/jgrc.20399

Bittig and Kortzinger, 2015: Tackling Oxygen Optode Drift: Near-Surface and In-Air Oxygen Optode Measurements on a Float Provide an Accurate in Situ Reference, *JAOT*, 32, 1536-1543, doi: 10.1002/jgrc.20399

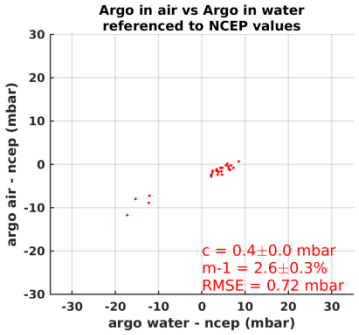
Argo Quality Control Manual For BioGeoChemical data, sur le site web de l'Argo Data Management (http://www.argodatamgt.org/Documentation)

Argo User's Manual, sur le site web de l'Argo Data Management (http://www.argodatamgt.org/Documentation)

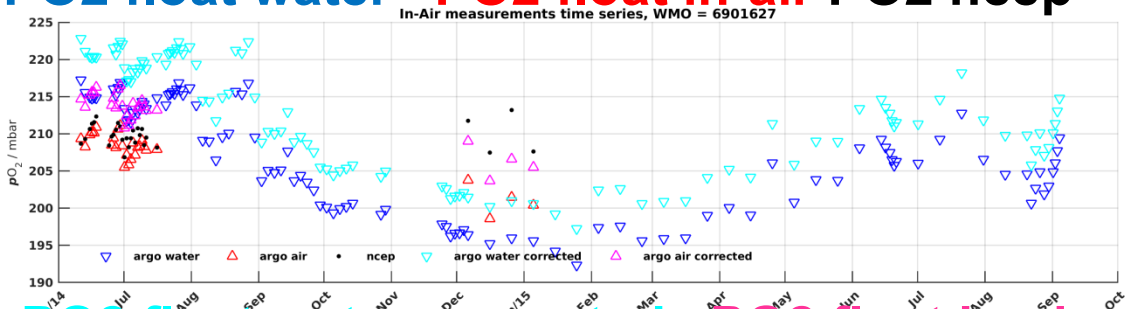
Correction : Mesure dans l'air



PO2 float water PO2 float in-air PO2 ncep



m = 1,0026 mBar



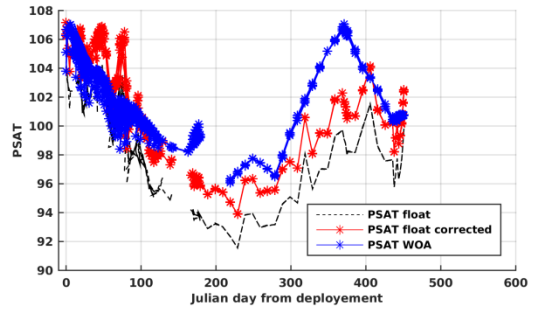
Equation:
y ~ beta2*x1 + (1 - beta2)/(1 + beta1/100)*x2

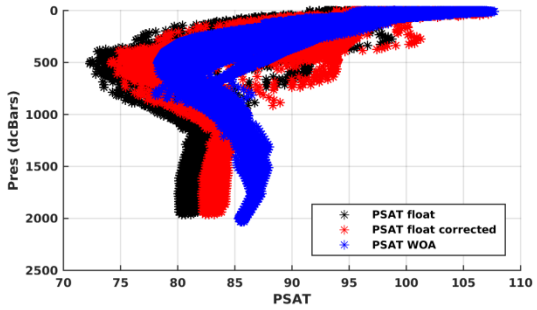
Coefficients:
beta1 = 2.56 +/- 0.25 %
beta2 = 0.40 +/- 0.03 mBar

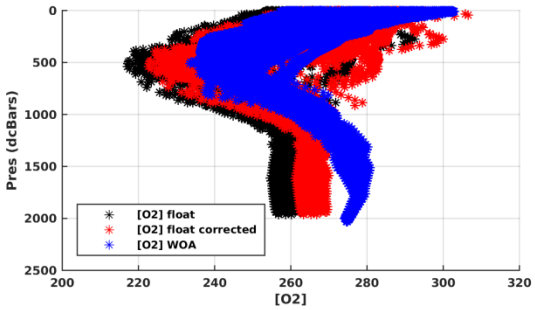
Stats:
beta1 pValues = 2.90e-19
beta2 pValues = 2.88e-17
Number of obs : 27
RMSE : 0.717
R-Squared : 0.950
Adjusted R-Squared : 0.948

R2 = 95%

PO2 float water corrected PO2 float in-air corrected







PSAT float raw **PSAT float corrected** **PSAT WOA**