

Universidade Federal do Rio Grande – FURG

Instituto de Oceanografia

Programa de Pós-Graduação em Oceanologia

**Avaliação da Turbidez e do Material
Particulado em Suspensão na Lagoa dos
Patos por Sensoriamento Remoto**

Rafael Avila Simão

Dissertação apresentada ao Programa
de Pós-Graduação em Oceanologia,
como parte dos requisitos para a
obtenção do Título de Mestre.

Orientador: *Prof. Dr.* Elisa Helena Leão Fernandes

Universidade Federal do Rio Grande (FURG), Brasil.

Co-orientador: *Prof. Dr.* Suhyb Salama

University of Twente (UT), Países Baixos.

Rio Grande, RS, Brasil

Agosto 2024

Avaliação da Turbidez e do Material Particulado em Suspensão na Lagoa dos Patos por Sensoriamento Remoto

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Oceanologia, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre.

Rafael Avila Simão

Rio Grande, RS, Brasil

Agosto 2024

© A cópia parcial e a citação de trechos desta tese são permitidas sobre a condição de que qualquer pessoa que a consulte reconheça os direitos autorais do autor. Nenhuma informação derivada direta ou indiretamente desta obra deve ser publicada sem o consentimento prévio e por escrito do autor.

Simão, Rafael Avila

Avaliação da Turbidez e do Material Particulado em Suspensão na Lagoa dos Patos por Sensoriamento Remoto / Rafael Avila Simão. – Rio Grande: FURG, 2024.

80 p.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande. Mestrado em Oceanologia. Área de Concentração: Física dos Oceanos e Clima.

1. Correção atmosférica. 2. Cor da água. 3. Estuário.
 4. Lagoa costeira. 5. Landsat. 6. Recalibração. 7. Sentinel.
- I. Avaliação da Turbidez e do Material Particulado em Suspensão na Lagoa dos Patos por Sensoriamento Remoto.



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE - FURG
IO – INSTITUTO DE OCEANOGRAFIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM OCEANOLOGIA
E-mail: ccpofgg@furg.br – home-page: www.pppo.furg.br



ATA ESPECIAL DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO – 07/2024

Às quatorze horas do dia dois de setembro do ano dois mil e vinte e quatro, no Auditório João Rocha-IO/FURG-C.Carreiros, reuniu-se a Comissão Examinadora da Dissertação de **MESTRADO** intitulada: “**AValiação da Turbidez e do Material Particulado em Suspensão na Lagoa dos Patos por Sensoriamento Remoto**”, do **Acad. Rafael Avila Simão**. A Comissão Examinadora foi composta pelos seguintes membros: Profa. Dra. Elisa Helena Leão Fernandes – Orientadora – (IO/FURG), Prof. Dr. Mhd. Suhyb Salama – Coorientador – (University of Twente-UT), Prof. Dr. Mauricio Almeida Noernberg – (UFPR), Profa. Dra. Maria Fernanda Coló Giannini – (IO/FURG), Prof. Dr. Fabrício Sanguinetti Cruz de Oliveira – (IO/FURG) e MSc. Juliana Távora Bertazo Pereira – (University of Twente-UT). Dando início à reunião, a Coordenadora do PPGO, Profa. Dra. Grasiela Lopes Leães Pinho, agradeceu a presença de todos e fez a apresentação da Comissão Examinadora. Logo após esclareceu que o candidato teria um tempo de 45 a 60 min para explanação do tema, e cada membro da Comissão Examinadora, um tempo máximo de 30 min para perguntas. A seguir, passou à palavra ao candidato que apresentou o tema e respondeu às perguntas formuladas. Após ampla explanação, a Comissão Examinadora reuniu-se em reservado para discussão do conceito a ser atribuído ao candidato. Foi estabelecido que as sugestões de todos os membros da Comissão Examinadora, que seguem em pareceres em anexo, foram aceitas pela Orientadora/Candidato para incorporação na versão final da Dissertação. Finalmente, a Comissão Examinadora considerou o candidato **APROVADO**, por unanimidade. Nada mais havendo a tratar, foi lavrada a presente ATA, por mim, Clabisnei Moura de Melo – Secretário PPGO, que após lida e aprovada, será assinada pela Comissão Examinadora, pelo Candidato e pela Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Oceanologia.

Elisa Helena Fernandes

Profa. Dra. Elisa Helena Leão Fernandes
Orientadora

Suhyb Salama
Digitally signed by Suhyb Salama
DN: cn=Suhyb Salama,
o=University of Twente,
ou=Faculty ITC,
email=s.salama@utwente.nl, c=NL
Date: 2024.09.16 15:58:24 +02'00'

Prof. Dr. Mhd. Suhyb Salama

Documento assinado digitalmente
MARIA FERNANDA COLO GIANNINI
Data: 10/09/2024 15:58:23-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Profa. Dra. Maria Fernanda Coló Giannini

Documento assinado digitalmente
MAURICIO ALMEIDA NOERNBERG
Data: 09/09/2024 09:08:04-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Mauricio Almeida Noernberg

Documento assinado digitalmente
RAFAEL AVILA SIMAO
Data: 16/09/2024 13:23:28-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Acad. Rafael Avila Simão

Fabrício Sanguinetti Cruz de Oliveira
Documento assinado digitalmente
JULIANA TAVORA BERTAZO PEREIRA
Data: 16/09/2024 13:16:41-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Fabrício Sanguinetti Cruz de Oliveira

MSc. Juliana Távora Bertazo Pereira
Documento assinado digitalmente
GRASIELA LOPES LEAES PINHO
Data: 18/09/2024 09:30:39-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof^a. Dr^a Grasiela Lopes Leães Pinho
Coordenadora PPGO

“As ideias brotam de algo maior do
que a pessoa humana singular. Não
as fazemos, elas nos fazem.”

(Carl G. Jung)

Agradecimentos

Se o percurso acadêmico até aqui não foi fácil, muito mais difícil foi estar tão longe da família. Tenham a certeza de que, se me afastei fisicamente, sempre estive com vocês em sentimento. Por isso, agradeço profundamente a quem me fez quem sou hoje: mãe, pai, padrasto, irmão e irmãs. Sem vocês, o mar não teria cor e nenhuma conquista faria sentido. Do fundo do coração, amo todos vocês!

Uma vez li que a gratidão acende as chamas da amizade, que iluminam o caminho por onde passamos. Sou grato aos amigos que fiz durante o mestrado e tornaram mais calorosos esses dois anos no frio do extremo sul do País. Agradeço especialmente a Julia, Juliana, Laura, Luis e Maria. Quero que saibam que sinto por não passar mais tempo ao lado de vocês e que, nesse mundo pequeno que é a oceanografia, torço para que nossos caminhos voltem a se cruzar.

Agradeço também a quem mudou a minha visão da oceanografia e do meu futuro. Se, quando entrei no mestrado, tinha sérias dúvidas sobre a vida acadêmica, vocês me inspiraram e abriram portas. Agradeço aos meus orientadores formais, Elisa e Suhyb, por todos os ensinamentos e motivações. Agradeço também à orientação da Juliana Távora, parte fundamental nesse processo. Talvez não saiba, mas tu és um dos principais motivos que me levou à FURG e sempre foi uma inspiração como pesquisadora.

Por fim, agradeço ao PPGO, à CAPES e ao CNPq por todo suporte, auxílios e bolsa. Em um mundo de mudanças cada vez mais aceleradas, que o apoio à ciência seja sempre uma constante!

Índice

Agradecimentos.....	6
Lista de Figuras.....	8
Lista de Tabelas.....	11
Resumo.....	12
Abstract.....	13
Capítulo I: Introdução.....	14
Capítulo II: Objetivos.....	22
Capítulo III: Área de Estudo.....	23
Capítulo IV: Material e Métodos.....	27
4.1 Dados.....	27
4.1.1 Dados de campo.....	27
4.1.2 Dados de satélite.....	28
4.2 Métodos.....	28
4.2.1 Correção atmosférica.....	28
4.2.2 Matchups.....	30
4.2.3 Algoritmos de turbidez e MPS.....	30
4.2.4 Convolução e recalibração regional.....	33
4.2.5 Parâmetros estatísticos.....	34
Capítulo V: Artigo Científico.....	37
Capítulo VI: Síntese da Discussão.....	65
Capítulo VII: Conclusões.....	68
Capítulo VIII: Referências Bibliográficas.....	70

Lista de Figuras

Figura 1. Lagoa dos Patos, com (a) distribuição espacial dos matchups para os três satélites (S2, S3 e L8) e duas variáveis (turbidez e MPS) e; (b, c) distribuições de frequência da ocorrência dos dados de campo, em diagramas de caixa (box plots) e histogramas para as regiões do Guaíba e do estuário.....	24
Figure 1. (a) Patos Lagoon (South Brazil) with in situ and satellite matchups for turbidity and SPM. Satellites are shown in different colors (orange, blue, and green indicate Sentinel-2 (S2), Sentinel-3 (S3), and Landsat-8 (L8), respectively), while SPM and turbidity matchups are marked with circles and crosses, respectively. The in situ data frequency distributions for (b) SPM and (c) turbidity are split into southern (estuário, in orange) and northern (Guaíba, in blue) areas of the lagoon.....	41
Figure 2. Radar plot with the selected statistical parameters (Kendall, MAE, MAPE, and WR). The resultant polygon area (in blue), centroid (red circle), and distance between the radar plot center and polygon centroid (dashed black line) are represented. The goodness of fit (GoF) metric summarizes the algorithm performance and is given by the product of the area and distance.....	45
Figure 3. Heatmaps of the turbidity algorithm performance, given in FNU (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR) for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The best (worst) performance is shown in green (red).....	46
Figure 4. Heatmaps of the SPM algorithm performance, given in g.m^{-3} (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR) for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The best (worst) performance is shown in green (red).....	47
Figure 5. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated turbidity values for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and S3 (c,f), and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and POLYMER (d–f). For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (D15 and N09) and bands (665 and 865 nm) are shown.....	48

Figure 6. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated SPM concentrations for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and S3 (c,f), and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and POLYMER (d–f). For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N10, N17, and T20) and bands (665 and 865 nm) are shown.....48

Figure 7. Heatmaps of the performance of the turbidity N09 algorithm using original (O) and recalculated (R) coefficients for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The results are given in FNU (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR). The best (worst) performance is shown in green (red).....49

Figure 8. Heatmaps of the SPM N10 algorithm performance using the original (O) and recalculated (R) coefficients for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The results are given in $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR). The best (worst) performance is shown in green (red).....50

Figure 9. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated turbidity values for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and (c,f) S3, and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and (d–f) POLYMER. For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N09) and bands (665 and 865 nm) are shown with the original (o) or recalibrated (r) coefficients.....50

Figure 10. Scatter plots the relationships between the measured and estimated SPM concentrations for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and (c,f) S3, and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and (d–f) POLYMER. For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N10) and bands (665 and 865 nm) are shown with the original (o) or recalibrated (r) coefficients.....51

Figure 11. Mean SPM concentration in the Patos Lagoon estuary based on S2 scenes, ACOLITE atmospheric correction, the N10 algorithm, the 665 nm band, and (a) original or (b) regionally recalibrated coefficients.....52

Figure 12. (a) Spatial distribution of in situ SPM data, along with the frequency distributions for SPM concentrations measured in situ and satellite-derived using the best combinations for each satellite (L8, S2, and S3) and recalibrated coefficients. The distributions are given for all available data points shown in (a) (including those that are

not matchups), divided into three parts of Patos Lagoon: (b) Guaíba, (c) center, and (d) estuary.....56

Figure A1. Time series of the sea surface temperature (SST) of Patos Lagoon based on in situ measurements (SiMCosta buoys) and reanalysis data (SST CCI L4 product).....58

Figure A2. Optical saturation based on the NIR (x-axis) and red (y-axis) reflectance. The red line denotes the fitted regression between these two bands (as in [32]).....58

Figure A3. Radar plots of the statistical parameters for the turbidity estimates. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.....59

Figure A4. Radar plots of the statistical parameters for the SPM estimates. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.....59

Figure A5. Radar plots of the statistical parameters for the turbidity estimates using the original (O) and recalibrated (R) coefficients. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.....60

Figure A6. Radar plots of the statistical parameters for the SPM estimates generated using the original (O) and recalibrated (R) coefficients. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.....60

Lista de Tabelas

Tabela 1. Parâmetros de entrada para o algoritmo T20 e satélites S3, S2 e L8.....	32
Table 1. Convolved coefficients for the turbidity (N09) and SPM (N10) algorithms....	44
Table 2. Best combinations of atmospheric correction (AC), algorithm (Alg), and band for each satellite and product based on the GoF metric.....	49
Table 3. Best combinations of atmospheric corrections (ACs), algorithms (Alg), bands, and coefficients (A and C) for each satellite and product based on the GoF metric. Regionally recalibrated coefficients are shown in bold font.....	52
Table A1. Recalibrated A coefficients for turbidity (N09 algorithm) and SPM (N10 algorithm) for each combination of satellites (L8, S2, and S3), atmospheric corrections (ACOLITE and POLYMER), and bands (665 and 865 nm).....	57

Resumo

O material particulado em suspensão (MPS) e a turbidez são duas variáveis importantes em ambientes costeiros, dado o seu papel na dinâmica biogeoquímica desses ambientes. Devido às alterações que causam na cor da água, essas variáveis podem ser estudadas por sensoriamento remoto. Destaca-se, porém, que inexistente uma metodologia (correção atmosférica e algoritmo) com desempenho superior às demais em todas as regiões. Assim, torna-se fundamental avaliar as estimativas em cada caso. O presente estudo teve como objetivo trazer recomendações para o sensoriamento remoto da turbidez e do MPS na Lagoa dos Patos (RS, Brasil). Estudos anteriores na área de estudo apontaram que a região possivelmente apresenta características ópticas distintas ao longo de sua extensão. Aqui, foram utilizadas imagens de três satélites (Sentinel-3, Sentinel-2 e Landsat-8) e comparadas diferentes correções atmosféricas (ACOLITE e POLYMER), algoritmos de turbidez e MPS (empíricos ou semi-analíticos; de banda única ou multibanda) e bandas (vermelho ou infravermelho próximo). As estimativas utilizando algoritmos estabelecidos na literatura, porém, apresentaram elevado viés, levando à necessidade de recalibração regional desses algoritmos. Isso foi realizado utilizando dados de campo de turbidez e MPS, aplicados a um método de ajuste de modelos geofísicos (GeoCalVal). As estimativas originais e recalibradas foram, então, classificadas com base em uma nova métrica (*goodness of fit* — GoF), que agrupa de forma objetiva diversos parâmetros estatísticos (correlação, acurácia, viés e comparação dos resíduos). Com base nessa métrica, recomenda-se a utilização da seguinte combinação para estimativas de turbidez na área de estudo: correção atmosférica do POLYMER, algoritmo de banda única, banda do infravermelho próximo e coeficientes originais. Para o MPS, a seguinte combinação é recomendada: correção atmosférica do ACOLITE, algoritmo de banda única, banda do infravermelho próximo e coeficientes recalibrados. Como recomendações para futuros trabalhos, tem-se a utilização de dados radiométricos de campo, aplicação de modelos de transferência radiativa e construção de séries temporais multissensores.

Palavras-Chave: correção atmosférica; cor da água; estuário; lagoa costeira; Landsat; recalibração; Sentinel.

Abstract

Suspended particulate matter (SPM) and turbidity are two important variables in coastal environments, given their roles in the biogeochemical dynamics of these regions. Changes in the color of the water associated with these variables make it possible to study them by remote sensing. However, no methodology performs better than the others for all regions. Therefore, it is fundamental to evaluate these estimates in each case. The objective of the present study was to give recommendations for the remote sensing of turbidity and SPM in Patos Lagoon (Brazil). Previous studies in this area suggested that it has distinct optical properties throughout its extension. Here, we used scenes from three satellites (Sentinel-3, Sentinel-2 e Landsat-8) and compared different combinations of atmospheric correction (ACOLITE and POLYMER), algorithms (empirical or semi-analytic; single or multi-band), and bands (red or near-infrared). Turbidity and SPM estimates from established algorithms were highly biased, leading to the need of recalibration of these algorithms regionally. The recalibration was performed using in situ turbidity and SPM measurements applied to a calibration method for geophysical models (GeoCalVal). Estimates using original and recalibrated products were further analyzed based on a novel metric (goodness of fit —GoF), which objectively gathers multiple statistical parameters (for correlation, accuracy, bias, and residuals). Based on this new metric, the following setup for estimating turbidity in Patos Lagoon is recommended: POLYMER atmospheric correction, single-band algorithm, near-infrared band, and original coefficients. On the other hand, the following setup for SPM is recommended: ACOLITE atmospheric correction, single-band algorithm, near-infrared band, and recalibrated coefficients. In future studies, we suggest the use of in situ radiometric data, the application of radiative transfer models, and the building of multi-sensor time series.

Keywords: atmospheric correction; coastal lagoon; estuary; Landsat; ocean color; recalibration; Sentinel.

Capítulo I: Introdução

Estuários são corpos de água semifechados, conectados livremente ao oceano, nos quais ocorre a mistura da água doce continental com a água salgada do mar [Pritchard 1967]. Essa definição abrange diversos ambientes transicionais entre o continente e o oceano, entre os quais se diferenciam as lagoas costeiras [Kjerfve 1994]: corpos de água interiores, geralmente paralelos a linha de costa, separados do oceano por uma barreira e conectadas a ele por um ou mais canais. É comum que partículas orgânicas e inorgânicas se mantenham em suspensão na coluna d'água desses ambientes [e.g. Távora *et al.* 2019], constituindo o material particulado em suspensão (MPS). O MPS possui grande importância para os processos biogeoquímicos, contribuindo para o transporte de nutrientes e contaminantes, além do balanço sedimentar de regiões costeiras [Turner & Millward 2002; Burchard *et al.* 2018].

A dinâmica de MPS nesses ambientes é governada pelos processos de advecção, decantação e ressuspensão, além de processos não-conservativos, como os de produção e destruição da matéria orgânica [Burchard *et al.* 2018]. Em situação de equilíbrio, a distribuição vertical do MPS depende do balanço entre a ação da gravidade e o transporte difusivo turbulento dos sedimentos, com um aumento exponencial da concentração em direção ao fundo [Rouse 1937; Boudreau & Hill 2020]. A coesividade dos sedimentos finos e a associação com a matéria orgânica aumentam a complexidade dessa dinâmica, levando à formação de flocos e alterando a velocidade de decantação

[Maggi 2013; Fall *et al.* 2021]. Tais condições de equilíbrio, porém, podem ser perturbadas pelo aporte fluvial, com formação de plumas e aumento das concentrações superficiais de MPS, principalmente em períodos de alta descarga [Zavialov *et al.* 2018; Bortolin *et al.* 2022].

Os processos de transporte e aprisionamento de MPS estão relacionados à formação de zonas de máxima turbidez, criadas pelo transporte convergente de MPS que ocorre no ambiente estuarino [Burchard *et al.* 2018]. A relação entre concentração de MPS e turbidez se dá pela capacidade das partículas absorverem e espalharem a luz, o que depende das características das partículas (distribuição de tamanhos, composição e formato) e da geometria da observação (ângulos de iluminação e de visada) [Kitchener *et al.* 2017]. Essa relação pode sofrer influência da absorção pela matéria orgânica dissolvida na água (*colored dissolved organic matter* — CDOM), o que é relevante em comprimentos de ondas mais curtos (como o azul), porém desprezível em comprimentos mais longos (como o infravermelho próximo, *near-infrared* — NIR) [Hongve & Åkesson 1998]. Em geral, uma relação linear entre turbidez e concentração de MPS é observada [*e.g.* Andrade Neto *et al.* 2012; Novoa *et al.* 2017] e a turbidez atua como um dos principais controladores do metabolismo aquático de algumas regiões, reduzindo a disponibilidade de luz para a fotossíntese [Bordin *et al.* 2023].

A dinâmica de MPS e da turbidez em ambientes costeiros é afetada pela atividade antrópica. Intervenções de engenharia costeira podem causar desequilíbrios hidrológicos e sedimentares, levando a problemas erosivos ou de sedimentação intensa, alterações na distribuição espacial da salinidade e mudanças ecológicas [Duck & Silva 2012]. O surgimento de estuários hipertúrbidos na Europa demonstra essa influência [Winterwerp & Wang 2013]: o aprofundamento e estreitamento dos canais navegáveis aumentou os fluxos de entrada de MPS (pela maré) ao mesmo tempo que diminuiu os fluxos de saída, levando ao aumento da turbidez. Somam-se a essas intervenções as mudanças climáticas, que impõe um risco crescente aos ambientes costeiros [Cloern *et al.* 2016]. Lagoas costeiras, por exemplo, são sensíveis às elevações do nível do mar, que, junto ao aporte de sedimentos em suspensão, estão relacionadas ao preenchimento ou inundação dessas regiões [Carrasco *et al.* 2016].

Por esses motivos, é necessário estudar e monitorar estuários e lagoas costeiras, especialmente quando já afetados pela atividade antrópica. Abordagens convencionais para o estudo da qualidade da água utilizam amostragens em campo, com coletas de água e análise gravimétrica para o MPS [Strickland & Parsons 1972; Neukermans *et al.*

2012] e utilização de turbidímetros para a medição da turbidez [Kitchener *et al.* 2017]. Tais métodos, porém, possuem suas limitações, associadas principalmente à cobertura espacial e temporal, análise laboratorial e custos envolvidos. Metodologias alternativas podem ser utilizadas para preencher as lacunas deixadas por essas abordagens. Em rios, por exemplo, curvas-chave entre a concentração de MPS e descarga líquida são uma ferramenta simples, eficiente e de baixo custo [Jung *et al.* 2020]. Para estuários, séries temporais da distribuição vertical de sedimentos em suspensão podem ser obtidas por meio de dados de ADCP (*Acoustic Doppler Current Profiler*) fundeado [Ávila *et al.* 2021]. Além disso, novas abordagens (como a filmagem submarina) permitem medições *in situ* das propriedades das partículas em suspensão [Fall *et al.* 2021].

Dentre as possibilidades, destaca-se o sensoriamento remoto óptico por satélites, única ferramenta capaz de medir de maneira sinóptica a biogeoquímica superficial dos oceanos [Cael *et al.* 2023]. Estudar o MPS por satélites é possível pela alteração que este causa na cor da água, devido ao espalhamento e absorção da luz. Deve se ter em mente, porém, que o sensoriamento remoto também possui suas dificuldades, como as limitações impostas pela cobertura de nuvens, limitação à camada superficial e incertezas associadas às estimativas [Pahlevan *et al.* 2021]. Além disso, nem toda a luz que chega ao sensor do satélite tem origem na água. Os gases e partículas na atmosfera absorvem e espalham a luz, levando a necessidade da correção atmosférica. Em geral, a reflectância obtida no topo da atmosfera (ρ_t), tal qual obtida por um sensor orbital, pode ser decomposta em [Gordon 1997; Salama *et al.* 2012a]:

$$\rho_t = T_g(\rho_R + \rho_a + T_v \rho_g + T_v \rho_w) \quad 1$$

Em que ρ_R , ρ_a , ρ_g e ρ_w são as reflectâncias associadas ao espalhamento Rayleigh, espalhamento por aerossóis, espalhamento especular da luz na superfície do mar (*sun glint*) e à coluna d'água (nossa variável de interesse). Os termos T_g e T_v correspondem à transmitância gasosa e à transmitância difusa de visada, decorrentes da passagem da luz pela atmosfera da superfície da água até o sensor. Parte dos termos da equação 1 pode ser resolvida sem grandes diferenças entre as metodologias existentes de correção atmosférica, a fim de obter a ρ_w [Mobley *et al.* 2016]. Esse processamento pode ser entendido em duas etapas [Pahlevan *et al.* 2021]: (i) correção do espalhamento Rayleigh e absorção gasosa; e (ii) estimativa da contribuição dos aerossóis.

O espalhamento Rayleigh (ρ_R) é ocasionado pelas moléculas dos gases e depende do número de moléculas no caminho percorrido pela luz, podendo ser estimado com base na pressão atmosférica e na geometria de iluminação e visada [Gordon *et al.* 1988; Bodhaine *et al.* 1999]. A transmitância gasosa (T_g) está muito associada aos gases absorvedores presentes na atmosfera, como é o caso do vapor de água, do ozônio (O_3), do oxigênio (O_2) e do dióxido de nitrogênio (NO_2) [Mobley *et al.* 2016]. Dados auxiliares de concentração desses gases na atmosfera (por satélites meteorológicos ou produtos de reanálise) são utilizados para estimar T_g [Salama *et al.* 2004; Salama *et al.* 2012a; Mobley *et al.* 2016]. Por outro lado, a transmitância difusa de visada (T_v) está relacionada à concentração e características dos aerossóis, incorporando tanto a atenuação da luz quanto o ganho pelo espalhamento de áreas adjacentes (contribuição difusa) [Salama *et al.* 2004; Mobley *et al.* 2016]. Alternativas para estimar T_v envolvem a utilização de valores tabelados, gerados com base em modelos de transferência radiativa [Mobley *et al.* 2016], e a utilização de modelos analíticos [Wang 1999].

Por sua vez, a contribuição dos aerossóis (ρ_a) apresenta um ponto de distinção importante entre as correções atmosféricas. Em águas oceânicas, a consideração do pixel escuro pode ser utilizada: a ρ_t medida na região do NIR corresponde (após demais correções, como as do efeito Rayleigh) à ρ_a , pois a água possui alta absorção nessa região do espectro [Gordon & Wang 1994]. Em águas costeiras, porém, a presença de MPS na água faz com que a ρ_w no NIR seja significativa, podendo corresponder a 89% da ρ_t [Luo *et al.* 2020].

As correções atmosféricas para regiões costeiras incluem alternativas à consideração do pixel escuro, envolvendo: (i) modelos iterativos para estimar a ρ_w no NIR [Bailey *et al.* 2010]; (ii) utilização do ajuste de espectro escuro, com a identificação de pixels e bandas com reflectância desprezível [Vanhellemont & Ruddick 2018]; (iii) métodos de aprendizado de máquina, como no caso de redes neurais [Doerffer & Schiller 2007; Brockmann *et al.* 2016] e; (iv) extrapolação da contribuição de comprimento de onda mais longos (como o NIR ou *shortwave-infrared* — SWIR) para comprimentos de onda mais curtos (como azul, verde e vermelho), seguindo o espectro de similaridade [Ruddick *et al.* 2006; Salama *et al.* 2012a; Vanhellemont & Ruddick 2014] e; (v) modelos de transferência radiativa, que realizam simulações para um amplo intervalo de condições atmosféricas [Vermote *et al.* 1997].

O último termo restante é o espalhamento especular pela superfície do mar (ρ_g). Sua contribuição pode ser estimada com base na geometria da luz e na velocidade do

vento, aplicados às equações de Cox & Munk [1954] para estimar a rugosidade da superfície do mar e às equações de Fresnel para estimar a reflectância correspondente [Bréon 1993], como em Bréon & Henriot [2006]. Essa correção, porém, depende de dados de velocidade e direção do vento com resolução adequada, que podem não estar disponíveis. Por esse motivo, algumas correções atmosféricas não estimam ρ_g por padrão, mas utilizam valores limites de reflectância em algumas bandas, marcando os pixels como inválidos caso esse limite seja ultrapassado [e.g. Vanhellemont & Ruddick 2018]. Uma alternativa é apresentada por Steinmetz *et al.* [2011], que fazem um ajuste espectral de um polinômio a um modelo bio-óptico para estimar as contribuições dos aerossóis (ρ_g) e do espalhamento especular (ρ_g) de maneira conjunta.

Corrigidos os efeitos atmosféricos, tem-se a variável de interesse para a aplicação de algoritmos de MPS e turbidez, a reflectância da água (ρ_w). Alterações em ρ_w podem ser parametrizadas com base nos coeficientes de retroespalhamento (b_b) e de absorção (a) da luz, tidos como propriedades ópticas inerentes (POI) da água do mar [Gordon *et al.* 1988; Nechad *et al.* 2010]:

$$\rho_w = \pi \Re \frac{f' b_b}{Q a + b_b} \quad 2$$

Em que \Re representa a reflexão e refração da luz na superfície da água e a razão f'/Q representa os efeitos bidirecionais da reflectância, já que ρ_w varia com os ângulos de iluminação e de visada [Loisel & Morel 2001]. Por sua vez, os coeficientes a e b_b são dados em função das constituintes opticamente ativas (COA) da água do mar (pigmentos fitoplanctônicos, CDOM e partículas não-algais). A dinâmica desses constituintes está associada a produção e destruição da matéria orgânica, efeitos de fotobranqueamento e fotodegradação e dinâmica de sedimentos em suspensão [Vantrepotte *et al.* 2013; Aurin *et al.* 2018; Bonelli *et al.* 2021]. A contribuição de cada constituinte para a absorção e espalhamento da luz pode ser dada como (modificado de Maritorena *et al.* [2002]):

$$a = a_w + a_{phy} + a_{CDOM} + a_p \quad 3$$

$$b_b = b_{bw} + b_{bp} \quad 4$$

Em que os subscritos w , phy , $CDOM$ e p correspondem à própria água, aos pigmentos fitoplanctônicos, ao CDOM e às partículas. Os coeficientes associados ao

material particulado (a_p e b_{bp}) são de interesse para o sensoriamento remoto da turbidez e do MPS, estando linearmente relacionados a essas variáveis [Nechad *et al.* 2009, 2010]:

$$a_p = a_p^* X \quad 5$$

$$b_{bp} = b_{bp}^* X \quad 6$$

Em que X representa a variável de interesse (turbidez ou concentração de MPS) e a_p^* e b_{bp}^* representam os coeficientes específicos de absorção por partículas e retroespalhamento por partículas, respectivamente. Com base nessas parametrizações, é possível traçar relações entre ρ_w , as POI e turbidez ou concentração de MPS [Nechad *et al.* 2009, 2010; Shen *et al.* 2010]. Apesar disso, deve se ter em mente que a grande variabilidade óptica encontrada em águas costeiras [Mélin & Vantrepotte 2015] gera alterações em a_p^* e b_{bp}^* [Babin *et al.* 2003a, 2003b]. O b_{bp}^* está relacionado ao tamanho, formato e composição das partículas [Babin *et al.* 2003a]. Processos como os de formação e destruição de flocos, por exemplo, são capazes de alterar as características do MPS e, assim, modificar o valor de b_{bp}^* [Bowers & Binding 2006]. Em alguns casos, como em Mabit *et al.* [2022], esse coeficiente pode não apresentar relação significativa com a concentração de MPS, indicando que alterações na concentração foram acompanhadas de mudanças nas características das partículas (teor de matéria orgânica, por exemplo), o que inviabiliza estudos por sensoriamento remoto.

A influência de outras COA também não deve ser ignorada. A presença de matéria orgânica particulada pode afetar a formação dos flocos [Fall *et al.* 2021], reduzindo o valor de b_{bp}^* , modificando a distribuição de tamanho das partículas e se relacionando com produção do fitoplâncton [Reynolds *et al.* 2016]. Na sua forma dissolvida, a matéria orgânica pode aumentar as incertezas nas estimativas, apesar de a_{CDOM} ser comumente ignorado em comprimentos de onda mais longos [Nechad *et al.* 2009, 2010]. Mabit *et al.* [2022] encontraram aumento (diminuição) da absorção por CDOM associado a subestimativas (superestimativas) da concentração de MPS. Vale notar que, na proximidade dos continentes, o CDOM possui fontes tanto autóctones (como pela remineralização da matéria orgânica) quanto alóctones (aporte fluvial), o que diminui sua covariação com os pigmentos fitoplanctônicos e aumenta a complexidade óptica das regiões costeiras [Aurin *et al.* 2018; Bonelli *et al.* 2021].

Ademais, tem-se que a relação entre reflectância e turbidez ou concentração de MPS não é sempre linear [Nechad *et al.* 2009, 2010; Shen *et al.* 2010]. Em águas túrbidas, a reflectância tende assintoticamente a um valor máximo, em um efeito conhecido como saturação óptica [Bowers *et al.* 1998]. A saturação ocorre quando o espalhamento e absorção da luz são dominados pelas partículas, fazendo com que ρ_w deixe de responder às variações na turbidez ou concentração de MPS [Luo *et al.* 2018]. Em regiões túrbidas, é comum que o espalhamento seja dominado pelas partículas (como considerado no algoritmo de Nechad *et al.* [2009, 2010]), porém a absorção pela água é relevante e aumenta com o comprimento de onda [*e.g.* Pope & Fry 1997]. Isso faz com que comprimentos de onda mais longos (como o NIR) estejam menos sujeitos à saturação e sejam indicados para condições de alta turbidez, enquanto comprimentos de onda mais curtos (como o verde e vermelho) saturam mais facilmente e sejam indicados para baixa turbidez [Ody *et al.* 2022]. Isso levou ao surgimento de algoritmos multibanda, que utilizam diferentes comprimentos de onda para quantificar os diferentes intervalos de turbidez ou concentração de MPS [Dogliotti *et al.* 2015; Han *et al.* 2016; Novoa *et al.* 2017].

Algoritmos de turbidez ou MPS, sejam eles de banda única ou multibanda, podem ser ainda divididos em relação à abordagem utilizada. Os algoritmos que se baseiam nas POI são conhecidos como analíticos (quando resolvem analiticamente as equações) [*e.g.* Salama & Verhoef 2015] ou semi-analíticos (quando fazem uso de aproximações empíricas) [*e.g.* Nechad *et al.* 2009, 2010; Dogliotti *et al.* 2015; Távora *et al.* 2020a]. Tais algoritmos oferecem como vantagem a utilização de coeficientes que possuem um significado físico [Shen *et al.* 2010] e são vistos como uma abordagem mais global. Apesar disso, esses algoritmos podem não ser ótimos para todos os casos [Mabit *et al.* 2022]. Algoritmos empíricos, por outro lado, se baseiam em relações estatísticas entre ρ_w e a variável de interesse, podendo apresentar desempenho superior em escala regional ou local, sem buscar uma cobertura global [Novoa *et al.* 2017; Mabit *et al.* 2022; Theenathayalan *et al.* 2022].

A diversidade de correções atmosféricas e algoritmos de turbidez e MPS disponíveis faz com que definir uma metodologia a ser aplicada para uma região específica não seja uma tarefa trivial, especialmente considerando que nenhuma metodologia existente supera as demais de maneira absoluta [Pahlevan *et al.* 2021]. Diferentes combinações de correção atmosférica e algoritmo podem apresentar diferentes desempenhos dependendo do local, banda, variável de interesse e tipo óptico

da água [Renosh *et al.* 2020; Vanhellemont & Ruddick 2021; Mabit *et al.* 2022; Theenathayalan *et al.* 2022; Hieronymi *et al.* 2023]. Dessa forma, torna-se fundamental avaliar as metodologias para cada caso.

Capítulo II: Objetivos

O objetivo geral do presente estudo é trazer recomendações para o sensoriamento remoto da turbidez e do MPS na Lagoa dos Patos. Para alcançar esse objetivo geral, foram definidos os seguintes objetivos específicos:

- I. Avaliar os erros associados a diferentes combinações de correção atmosférica e algoritmo de turbidez ou MPS;
- II. Avaliar a contribuição da recalibração regional das estimativas de turbidez e MPS;
- III. Determinar a melhor combinação de correção atmosférica e algoritmo para a área de estudo.

Capítulo III: Área de Estudo

A Lagoa dos Patos (Fig. 1) possui cerca de 10.000 km² e é considerada a maior lagoa costeira do tipo estrangulado do mundo [Kjerfve 1986]. Com cerca de 250 km de comprimento e 40 km de largura, conecta-se ao oceano por um único e estreito canal (700 m de largura), que canal atua como um filtro passa-baixa, atenuando a propagação de oscilações do nível do mar [Fernandes *et al.* 2004]. Assim, a maré, mista e com predominância diurna, possui influência restrita ao baixo estuário da Lagoa dos Patos [Fernandes *et al.* 2004].

Do ponto de vista hidrodinâmico, a Ponta da Feitoria (Fig. 1) marca o limite teórico da região estuarina, na qual observam-se a influência da maré, da descarga fluvial e dos efeitos local e não-local do vento [Moller *et al.* 2001; Fernandes *et al.* 2004]. Por outro lado, o restante da Lagoa dos Patos possui maior influência da descarga fluvial e da ação local do vento [Moller *et al.* 2001]. Em ambos os casos, ventos de quadrante Sul geram uma depressão do nível do mar no limite estuarino (Ponta da Feitoria), promovendo entrada de águas salinas no interior da lagoa [Moller *et al.* 2001]. Ventos de quadrante Norte geram o efeito oposto, com elevação do nível do mar na região estuarina e fluxos da lagoa para o oceano [Moller *et al.* 2001]. Além disso, o efeito não-local do vento faz com ventos de quadrante Sul levem a um aumento do nível da água na região costeira, ao passo que vento de quadrante Norte levam a diminuição desse nível [Moller *et al.* 2001].

A descarga fluvial também contribui para a hidrodinâmica da Lagoa dos Patos modulando seu nível e gerando um fluxo médio em direção ao oceano [Moller *et al.* 2001; Fernandes *et al.* 2002]. Tal descarga se dá pelos três principais tributários na região [Vaz *et al.* 2006]: Rio Guaíba, Rio Camaquã e Canal São Gonçalo. Dentre estes, o Guaíba é o principal tributário, tendo como principais afluentes os rios Jacuí, Taquari, Caí, Sinos e Gravataí [Vaz *et al.* 2006; Andrade Neto *et al.* 2012]. Por outro lado, o rio Camaquã apresenta uma menor bacia de drenagem, tornando-o mais susceptível a rápidas mudanças de descarga [Bortolin *et al.* 2022]. Já o Canal São Gonçalo conecta a Lagoa dos Patos à Lagoa Mirim, com um fluxo geralmente unidirecional (em direção à Lagoa dos Patos) controlado pela diferença de nível entre as lagoas [Oliveira *et al.* 2015, 2019].

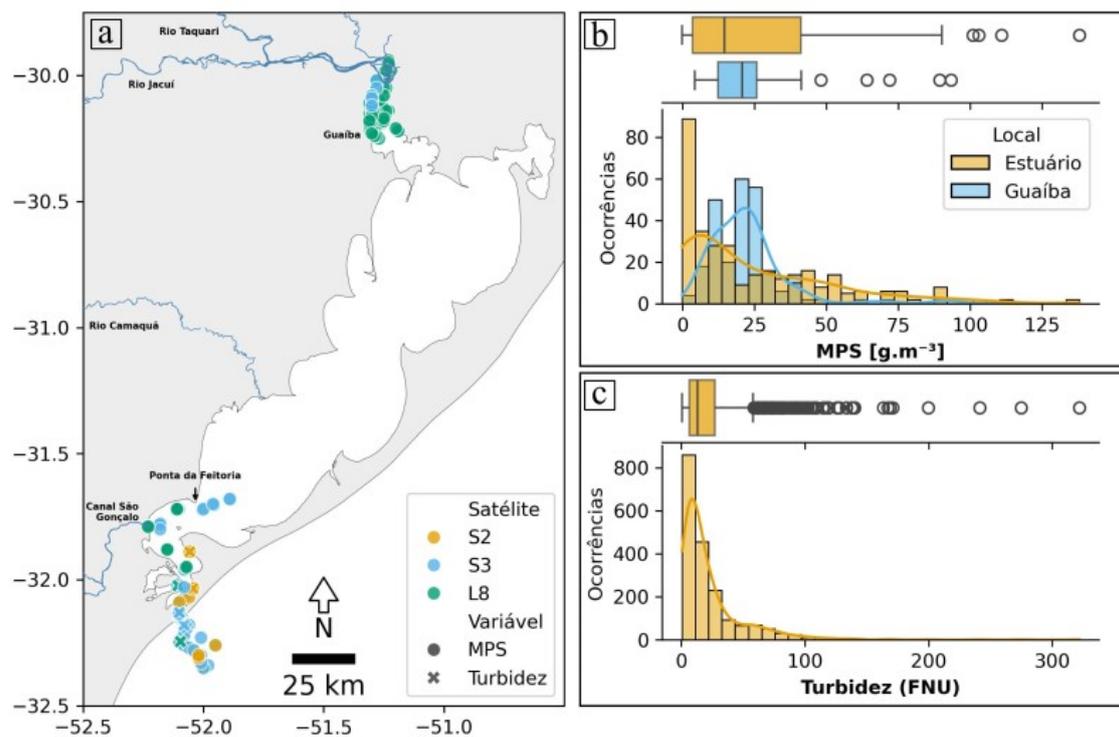


Figura 1. Lagoa dos Patos, com (a) distribuição espacial dos *matchups* para os três satélites (S2, S3 e L8) e duas variáveis (turbidez e MPS) e; (b, c) distribuições de frequência da ocorrência dos dados de campo, em diagramas de caixa (*box plots*) e histogramas para as regiões do Guaíba e do estuário.

Ventos e descarga fluvial apresentam variabilidade sazonal, interanual [Moller *et al.* 2001; Bitencourt *et al.* 2020; Távora *et al.* 2020b] e interdecadal [Bortolin *et al.*

2022] na região. A ação do vento é preponderante em períodos em que a soma das vazões dos tributários da Lagoa dos Patos é inferior a 2000 m³/s, o que ocorre principalmente nas estações de verão e outono e em ciclos de La Niña [Moller *et al.* 2001; Bitencourt *et al.* 2020]. Ventos de quadrante Sul são predominantes nos meses de inverno, enquanto ventos de quadrante Norte são predominantes nos meses de verão [Moller *et al.* 2001]. Quando a soma das vazões dos tributários é superior a 2000 m³/s, a ação da descarga fluvial se sobrepõe ao vento, favorecendo o gradiente de pressão que promove a saída de água da lagoa [Moller *et al.* 2001; Fernandes *et al.* 2002; Bitencourt *et al.* 2020]. Esses períodos de maior descarga ocorrem principalmente no final do inverno e na primavera, assim como em fases de El Niño [Vaz *et al.* 2006; Bortolin *et al.* 2022]. Além disso, os ciclos de El Niño/La Niña possuem uma variabilidade interdecadal, levando a fases mais intensas ou não, o que reflete na descarga fluvial e na dinâmica do MPS na região [Bortolin *et al.* 2022].

A dinâmica da turbidez e MPS na Lagoa dos Patos segue as mesmas forçantes da hidrodinâmica (ventos e descarga fluvial) [Távora *et al.* 2019; Bortolin *et al.* 2022]. Em geral, as concentrações de MPS diminuem a jusante da lagoa, com valores em torno de 38 g.m⁻³ em sua porção mais interna e em torno de 10 g.m⁻³ na região do baixo estuário [Távora *et al.* 2019]. Já para a turbidez, os valores geralmente ficam abaixo de 100 NTU, mas podem ultrapassar os 300 NTU em algumas situações (Fig. 1). Turbidez e MPS na região estão diretamente relacionados, sendo comumente encontrada uma relação linear entre essas variáveis [*e.g.* Andrade Neto *et al.* 2012; Ávila *et al.* 2021]. Essas variáveis alteram a atenuação da luz na coluna d'água, estando entre os principais controladores da produção primária e do metabolismo aquático na região [Bordin *et al.* 2023].

O MPS adentra na Lagoa dos Patos por seus três principais tributários (Guaíba, Rio Camaquã e Canal São Gonçalo), que dividem a dinâmica desse material em duas situações distintas [Bortolin *et al.* 2022]: (i) Períodos de alta descarga, que apresentam maiores concentrações de MPS, com plumas fluviais mais pronunciadas e toda a região se tornando túrbida; (ii) períodos de baixa descarga, nos quais são observadas concentrações mais baixas de MPS e as plumas dos tributários ficam restritas às suas desembocaduras.

Assim como para a descarga líquida, o Guaíba possui a maior contribuição, com aporte anual de cerca de 1,1×10⁶ toneladas de MPS [Andrade Neto *et al.* 2012]. Camaquã e São Gonçalo também possuem influência nas concentrações desse material

[Jung *et al.* 2020], especialmente em escala episódica [*e.g.* Hartmann & Harkot 1990]. Soma-se à descarga a influência dos ventos, que depende de sua direção e intensidade [Távora *et al.* 2019]: ventos de quadrante Sul geram fluxos de MPS em direção ao interior da lagoa, enquanto ventos de quadrante Norte promovem fluxos em direção ao oceano. Assim, parte do MPS que adentra a Lagoa dos Patos se deposita em seu interior [Bortolin *et al.* 2020] e parte é transportado pelo canal que a conecta ao oceano [Ávila *et al.* 2021]. Nesse último caso, tem-se a ocorrência de plumas costeiras, cuja formação e distribuição horizontal é governada pela descarga fluvial e padrão de ventos [Marques *et al.* 2009], contribuindo para o padrão de deposição de sedimentos finos na região costeira adjacente [Marques *et al.* 2010].

Capítulo IV: Material e Métodos

4.1 Dados

4.1.1 Dados de campo

Dados *in situ* de turbidez foram obtidos pelas boias RS1, RS2 e RS4 do Sistema de Monitoramento da Costa Brasileira (SiMCosta; simcosta.furg.br/home), localizadas na região estuarina da Lagoa dos Patos (Fig. 1). As boias realizam as medições de turbidez utilizando o comprimento de onda de 700 nm. Os dados foram obtidos para o período entre 2016 a 2021 e passaram por controles de qualidade do SiMCosta [Bushnell *et al.* 2020]: (i) *gross range test*, que confere os limites de leitura do equipamento; (ii) *spike test*, que verifica picos na série temporal; (iii) *rate of change test*, que verifica a variabilidade em uma janela de tempo; (iv) *flat line test*, que verifica medições repetidas. Além dos dados das boias, também foram utilizadas medições realizadas em diferentes projetos na Lagoa dos Patos, que estão sendo organizadas em um banco de dados para futura publicação [Moller *et al. in prep.*].

Os dados de MPS foram obtidos do compêndio organizado por Távora *et al.* [2021]. O conjunto de dados reúne medições realizadas na Lagoa dos Patos utilizando diferentes metodologias, de 1979 a 2019. Os autores realizaram o pré-processamento (para garantir a consistência entre unidades e remover dados com informações faltando)

e agrupamento (com remoção de dados duplicados) desses dados, seguindo Valente *et al.* [2016]. Para o presente trabalho, somente foram utilizadas medições realizadas *in situ* (o compêndio também inclui dados de satélite) e em superfície (menos de 1 m de profundidade).

4.1.2 Dados de satélite

Foram utilizadas imagens de três satélites/sensores, que apresentam diferentes características: Sentinel-3, Sentinel-2 e Landsat-8, referidos no restante do texto como S3, S2 e L8, respectivamente. O S3 conta com dois satélites (S3A e S3B, lançados em 2016 e 2018, respectivamente) equipados com o mesmo sensor (*Ocean and Land Color Instrument* — OLCI), que possuem resolução espacial de 300 m e, combinados, resolução temporal de 1 dia. O S2 também conta com dois satélites (S2A e S2B, lançados em 2015 e 2017, respectivamente) equipados com o mesmo sensor (*Multispectral Instrument* — MSI), com resolução espacial entre 10 e 60 m (dependendo da banda utilizada) e resolução temporal combinada de 5 dias. O L8 foi lançado em 2013 e é equipado com o sensor *Operational Land Imager* (OLI), contando com resolução espacial de 30 m e resolução temporal de 16 dias.

Imagens do S3 e S2 entre 2016 e 2022 foram baixadas pelo *application programming interface* (API) do Copernicus (dataspace.copernicus.eu/), acessada com o Earth Observation Data Access Gateway (EODAG; eodag.readthedocs.io/en/stable/). Somente foram consideradas imagens do S3 que cobrissem toda a área de estudo (entre 30,00°S e 52,75°O, e 32,75°S e 50,30°O). Para o S2, somente foram consideradas imagens com cobertura de nuvens inferior a 10% e que apresentassem medições *in situ* na mesma data e região. Todas as imagens do L8 entre 2013 e 2022 para a área de estudo foram baixadas, utilizando a API do Serviço Geológico dos Estados Unidos (*United States Geological Survey* — USGS; m2m.cr.usgs.gov/).

4.2 Métodos

4.2.1 Correção atmosférica

Foram comparados dois métodos para a correção dos efeitos atmosféricos: ACOLITE *Dark Spectral Fitting* (DSF; versão 20221114.0) e POLYMER (versão 4.13). Ambos os métodos já foram comparados em outras regiões [*e.g.* Theenathayalan *et al.*

2022; Barreneche *et al.* 2023] e também aplicados à Lagoa dos Patos [Bortolin *et al.* 2020; Távora *et al.* 2020b, 2023a]. A distinção fundamental entre os métodos está na forma com que estimam a contribuição dos aerossóis (ρ_a) e o espalhamento especular da superfície do mar (ρ_g), apresentados na equação 1.

O ACOLITE DSF foi desenvolvido por Vanhellemont & Ruddick [2018] e se fundamenta na consideração de que a ρ_w é desprezível em ao menos um pixel e banda na imagem. Assim, removidos os demais efeitos atmosféricos, pode-se considerar que a reflectância nesse pixel e banda é decorrente unicamente do espalhamento por aerossóis (ρ_a). Na prática, o método busca os menores valores de reflectância em cada banda e relaciona esses valores à profundidade óptica de aerossóis (variável que envolve a atenuação da luz pelos aerossóis). O menor valor da profundidade óptica é mantido e utilizado para estimar a contribuição dos aerossóis, com base em um modelo de transferência radiativa [Vermote *et al.* 1997]. São marcados nas *flags* de qualidade do ACOLITE os pixels com alta reflectância na banda do SWIR (1), nuvens do tipo Cirrus (2), alta reflectância de topo da atmosfera (4), reflectâncias negativas (8) e pixels fora da cena do satélite (16). Por padrão, o ACOLITE não realiza a correção para o espalhamento especular (ρ_g), identificando esses casos pela alta reflectância e marcando os pixels como inválidos (apesar de possuir uma opção adicional para essa correção, não utilizada aqui). No presente trabalho, foram tratados como inválidos todos os pixels marcados por alguma *flag* do ACOLITE (isto é, somente foram aceitos pixels com *flag* = 0).

O POLYMER foi desenvolvido por Steinmetz *et al.* [2011] e modificado por Steinmetz & Ramon [2018], com a proposta de correção atmosférica mesmo em condições de *sun glint*. Para isso, o método utiliza um polinômio e um modelo bio-óptico [Park & Ruddick 2005]. O polinômio inclui termos que não variam com comprimento de onda (para o espalhamento especular) ou que variam inversamente com o comprimento de onda (para os aerossóis). Já o modelo bio-óptico, utiliza termos para a concentração de clorofila-a e para o retroespalhamento por partículas (b_{bp}). Após aplicadas as correções iniciais, o algoritmo ajusta simultaneamente o polinômio e o modelo, alterando os parâmetros livres em ambos a fim de minimizar uma função de custo. Os coeficientes finais aplicados ao polinômio correspondem, então, à soma de ρ_a e ρ_g . As *flags* de qualidade do POLYMER envolvem 11 categorias, que se aplicam a pixels inválidos, inconsistentes ou de águas costeiras (águas de Caso 2). No presente trabalho, foram tratados como inválidos os pixels marcados por alguma *flag* do

POLYMER, com exceção da *flag* para águas de Caso 2 (ou seja, somente foram aceitos pixels com *flag* = 0 ou *flag* = 1024).

4.2.2 Matchups

A avaliação das estimativas de turbidez e concentração de MPS depende de medições *in situ* temporal e espacialmente próximas da passagem do satélite, comumente chamadas de *matchups*. Para a turbidez, foram considerados *matchups* com medições realizadas dentre 30 minutos da passagem do satélite. Para o MPS, foram consideradas coletas no mesmo dia da passagem, já que o compêndio de Távora *et al.* [2021] não traz o horário das medições. Foram extraídas das imagens de satélite janelas de 3 por 3 pixels ao redor das coordenadas com medições *in situ*.

Os valores extraídos passaram por um controle de qualidade, de forma que não foram considerados pixels: (i) com valores negativos de ρ_w ; (ii) marcados como inválidos pela correção atmosférica (em função de nuvens, *sun glint*, proximidade com o continente, *etc.*); (iii) com valores do *quality water index polynomial* (QWIP) superiores a 0,3 ou inferiores a -0,3. O QWIP [Dierssen *et al.* 2022] utiliza uma relação entre a média harmônica dos comprimentos de onda [Vandermeulen *et al.* 2020] e uma razão normalizada de bandas (entre azul e vermelho), tendo sido desenvolvido com base em águas com diferentes características ópticas. Assim, é possível estimar o quão distante um espectro de ρ_w está do esperado pela relação, oferecendo uma medida da qualidade desse espectro. Após os pixels, um controle de qualidade foi aplicado às janelas extraídas, seguindo as recomendações do *International Ocean Colour Coordinating Group* — IOCCG [2019]. Assim, foram excluídas janelas com menos de 50% de pixels válidos (menos de 5 pixels) ou com coeficiente de variação (razão entre desvio padrão e média) superior a 0,2. A mediana das ρ_w das janelas que passaram pelo controle de qualidade foram utilizadas para os algoritmos de turbidez e MPS.

4.2.3 Algoritmos de turbidez e MPS

A escolha dos algoritmos se deu de maneira a englobar métodos baseados em relações empíricas e semi-analíticas, e que utilizassem uma única ou múltiplas bandas. Para turbidez, foram comparados os algoritmos de [Nechad *et al.* 2009] e [Dogliotti *et al.* 2015], referidos no restante do texto com N09 e D15, respectivamente. O algoritmo

N09 utiliza uma abordagem semi-analítica, que se fundamenta nos coeficientes de absorção e espalhamento por partículas para traçar uma relação entre ρ_w e turbidez, conforme a equação 6.

$$T = \frac{A \rho_w}{1 - \rho_w / C} \quad 6$$

Em que T é a turbidez (dada em FNU) e A e C são coeficientes empíricos definidos pelos autores. O coeficiente A foi calibrado por [Nechad *et al.* 2009] com base em medições simultâneas de ρ_w e de turbidez, representando a relação linear da relação. O coeficiente C foi obtido pelos autores com base em valores típicos de a_p^* e b_{bp}^* [Babin *et al.* 2003ab], definindo o valor da reflectância de saturação. Juntos, os coeficientes A e C levam a uma relação logarítmica entre ρ_w e turbidez. Para o presente trabalho, foram utilizados os coeficientes fornecidos pelos autores para as bandas do vermelho (~665 nm para S3 e S2; ~655 nm para L8) e NIR (~865 nm) [Nechad *et al.* 2009], convolucionados para cada sensor (seção seguinte).

A relação logarítmica existente entre as variáveis faz com que a sensibilidade da ρ_w à turbidez diminua conforme se aproxima da saturação [*e.g.* Ody *et al.* 2022]. Para contornar isso, o algoritmo de D15 aplica a mesma relação semi-analítica (Eq. 6), mas traz um mecanismo de troca de bandas. A banda do vermelho é utilizada para valores baixos e moderados de reflectância ($\rho_w < 0,05$), enquanto a banda do NIR é utilizada para alta reflectância ($\rho_w > 0,07$). Para valores de ρ_w entre 0,05 e 0,07, as bandas são combinadas com pesos (entre 0 e 1) que variam linearmente dentro desse intervalo.

Para o MPS, foram comparados os algoritmos de Nechad *et al.* [2010], Távora *et al.* [2020a] e Novoa *et al.* [2017], referidos no restante do texto como N10, T20 e N17, respectivamente. O algoritmo N10 se baseia na mesma relação da equação 6 para estimar a concentração de MPS. Novamente, foram utilizadas as bandas do vermelho e NIR e coeficientes fornecidos pelos autores [Nechad *et al.* 2010], convolucionados para cada sensor (seção seguinte).

Já o algoritmo T20 traz uma aplicação multibanda da relação semi-analítica de N10, mas sem um mecanismo de troca. Por padrão, T20 utiliza todos os comprimentos de onda mais longos que 600 nm (com exceção da região entre 670 e 700, devido ao sinal de fluorescência da clorofila-a). Para o presente trabalho, somente foram consideradas as bandas entre 630 e 670 nm e entre 700 e 885 nm, com os parâmetros de

entrada mostrados na Tabela 1. Além disso, o algoritmo considera intervalos de valores para as POI, em vez de valores fixos. Os valores de *shape* (*S* e *gamma*) são utilizados por T20 para extrapolar os valores das POI de um comprimento de onda de referência para os demais. Os valores para esses comprimentos de onda de referência são dados pelos intervalos de a^*_{NAP} (443 nm), a^*_{NAP} (750 nm) e b^*_{bp} (700 nm), que representam os coeficientes específicos de absorção por partículas não-algais (em 443 e 750 nm) e de retroespalhamento por partículas (em 700 nm).

Tabela 1. Parâmetros de entrada para o algoritmo T20 e satélites S3, S2 e L8.

	S3	S2	L8
Comprimento de onda (nm)	665; 674; 681; 709; 754; 767; 779; 865; 885	665; 705; 740; 783; 842; 865	655; 865
Largura de banda (nm)	10; 7,5; 7,5; 10; 7,5; 2,5; 15; 20; 10	30; 15; 15; 20; 115; 20	30; 30
Razão sinal-ruído	1553; 1336; 1326; 1423; 1128; 559; 1513; 1238; 819	142; 117; 89; 105; 172; 72	227; 204
Parâmetro de <i>shape</i> (<i>S</i>)	[0,004; 0,016]	[0,004; 0,016]	[0,004; 0,016]
Parâmetro de <i>shape</i> (<i>gamma</i>)	[0; 1,8]	[0; 1,8]	[0; 1,8]
a^*_{NAP} (443 nm)	[0,01; 0,06]	[0,01; 0,06]	[0,01; 0,06]
a^*_{NAP} (750 nm)	[0,013; 0,015]	[0,013; 0,015]	[0,013; 0,015]
b^*_{bp} (700 nm)	[0,002; 0,021]	[0,002; 0,021]	[0,002; 0,021]

Em cada comprimento de onda, a concentração de MPS por T20 é dada pela mediana das estimativas, utilizando os intervalos de valores para as POI. O valor final é calculado com base na média dessas estimativas em todos os comprimentos de onda utilizados, ponderada pela incerteza das medições. No caso de estimativas por satélite, a incerteza pode ser dada pelo menor valor entre a razão sinal-ruído do sensor e o desvio padrão da janela extraída.

Além disso, o algoritmo T20 também necessita da temperatura da água como entrada, utilizada para estimar a absorção pela água (a_w). A temperatura da superfície do

mar foi obtida do Climate Change Initiative (CCI; cds-beta.climate.copernicus.eu/datasets/satellite-sea-surface-temperature) [Merchant *et al.* 2019], conjunto de dados de reanálise que utiliza medições por diferentes satélites, com dados diários e resolução espacial de $0,05^\circ \times 0,05^\circ$. Esses dados foram comparados com médias diárias da temperatura medida pelas boias RS1 e RS2 do SiMCosta, mostrando um bom ajuste para a área de estudo (MAE=1,02 °C; MAPE=5,0%; Bias=-0,57 °C; Kendall=0,82).

Por último, o N17 é um algoritmo empírico multibanda, desenvolvido para o estuário de Gironde e já aplicado a outras regiões [e.g. Távora *et al.* 2020b; Ody *et al.* 2022]. O N17 estima a concentração com base em três bandas (Eq. 7, 8 e 9): para valores baixos de reflectância ($\rho_w < 0,007$), o algoritmo utiliza uma relação linear entre a banda do verde (~560 nm) e a concentração de MPS; para valores intermediários ($\rho_w > 0,016$ e $\rho_w < 0,08$), utiliza uma relação linear com a banda do vermelho (~665 nm); para alta reflectância ($\rho_w > 0,12$), aplica um polinômio à banda do NIR (~865 nm). Entre esses casos, são aplicados pesos a cada banda, definidos considerando a relação entre as reflectâncias. Como a saturação óptica ocorre mais facilmente em comprimentos de onda mais curtos, a relação entre as reflectâncias do verde e vermelho e entre vermelho e NIR segue uma curva logarítmica. Pesos variáveis para cada banda são definidos utilizando os valores de ρ_w e os pontos em que essa curva apresenta uma inclinação de 45° . Isso promove uma transição suave e maximiza a sensibilidade de cada banda, como demonstrado em Ody *et al.* [2022].

$$MPS(verde) = 130,1 \rho_w(verde) \quad 7$$

$$MPS(vermelho) = 531,5 \rho_w(vermelho) \quad 8$$

$$MPS(NIR) = 37,150 \rho_w(NIR)^2 + 1751 \rho_w(NIR) \quad 9$$

4.2.4 Convolução e recalibração regional

Os coeficientes dos algoritmos N09 e N10 foram obtidos pelos autores por meio de medições radiométricas de campo. O sensor utilizado, porém, possui características espectrais (número e largura das bandas, por exemplo) distintas das características dos sensores dos satélites. Para o presente trabalho os coeficientes de N09 e N10 foram ajustados utilizando o método de convolução espectral, seguindo Távora *et al.* [2023b] (<https://github.com/julianatavora/High-resolution-satellites-primer-codes/tree/main/>)

[spectral conv](#)). A convolução espectral considera a resposta espectral relativa (*relative spectral response* — RSR), que descreve a sensibilidade do sensor dos satélites em cada comprimento de onda. Para cada banda, o valor ajustado do coeficiente é dado pela média dos valores entre o comprimento de onda mínimo e máximo da banda, ponderados pela RSR.

Mesmo após a convolução, os coeficientes de N09 e N10 podem levar a resultados aquém do esperado [e.g. Theenathayalan *et al.* 2022]. No presente trabalho, uma recalibração regional do coeficiente A (Eq. 6) de N09 e N10 foi realizada, utilizando os dados disponíveis de campo (turbidez e MPS) e de satélite (ρ_w). Para o coeficiente C , foram adotados os valores convolucionados (sem recalibração), já que não foi observada saturação completa nos dados. O método GeoCalVal [Salama *et al.* 2012b] foi escolhido para a recalibração, combinando dois métodos de amostragem aleatória (*jackknife* e *bootstrapping*) para criar um grande número de conjuntos de calibração e validação. O modelo fornece como resultado os valores do coeficiente calibrado e dos parâmetros estatísticos para cada par de calibração e validação. Vale notar que o GeoCalVal foi desenvolvido para o ajuste de modelos geofísicos lineares e, assim, sua aplicação não se restringe ao MPS e à turbidez. No presente trabalho, o método foi adaptado para a equação 6, com ajuste não-linear pelo método de mínimos quadrados. Foram utilizadas as medianas dos coeficientes calibrados e dos parâmetros estatísticos de validação (seção seguinte). Como exceção, o *win rate* (WR) foi calculado após o processamento, considerando todo o conjunto de dados.

4.2.5 Parâmetros estatísticos

Quantificar os erros das estimativas por sensoriamento remoto depende da utilização de parâmetros estatísticos [e.g. Pahlevan *et al.* 2021]. Para o presente trabalho, seis parâmetros foram utilizados para comparar dados medidos e estimados (Eq. 10 a 15), seguindo as recomendações de Seegers *et al.* [2018]: (i) o coeficiente *tau* de Kendall, que fornece uma medida não-paramétrica de correlação entre os dados; (ii) raiz quadrada do erro quadrático médio (*root mean-square error* — RMSE), como uma medida de acurácia adequada a resíduos normalmente distribuídos [Willmott *et al.* 2017]; (iii) erro absoluto médio (*mean absolute error* — MAE), outra medida de acurácia, porém que independente da distribuição dos resíduos; (iv) erro absoluto médio percentual (*mean absolute percentage error* — MAPE), que normaliza o MAE com

base nos valores medidos; (v) viés (*Bias*), que indica se as estimativas estão sub ou superestimadas; (vi) taxa de vitória (*win rate* — WR) [Broomell *et al.* 2011], que verifica o percentual de vezes em que um algoritmo supera (em termos de resíduo) cada um dos demais e, ao final, calcula o percentual médio. Ao contrário do realizado por Seegers *et al.* [2018], os parâmetros estatísticos não utilizaram a transformação logarítmica. Assim, seus valores são dados nas unidades de cada variável (FNU para turbidez e g.m⁻³ para MPS), como valores absolutos (para o Kendall) ou como percentuais (para MAPE e WR).

$$Kendall = (P - Q) / \sqrt{(P + Q + T) * (P + Q + U)} \quad 10$$

$$RMSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad 11$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} |\hat{y}_i - y_i| \quad 12$$

$$MAPE(\%) = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^{i=n} \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{|y_i|} \quad 13$$

$$Bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} \hat{y}_i - y_i \quad 14$$

$$WR_A(\%) = \frac{1}{C_{m,2}^A} \cdot \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^m \frac{100}{n} \sum_{j=1}^{j=n} \begin{cases} 1, & \text{se resíduo}_{A,j} < \text{resíduo}_{B,j} \\ 0, & \text{se resíduo}_{A,j} > \text{resíduo}_{B,j} \end{cases} \quad 15$$

Em y e \hat{y} são os valores medido e estimado de turbidez ou concentração de MPS e n é o número de *matchups*. Para o WR, A e B representam combinações de correção atmosférica e algoritmo, m é o número de algoritmos disponíveis e $C_{m,2}^A$ dá o número de combinações que incluem A . O resíduo é dado pelo valor absoluto da diferença entre cada estimativa e medição. Para o coeficiente *tau* de Kendall, os dados medidos e previstos são organizados em ordem crescente com base em apenas um desses conjuntos. Para o conjunto restante, o valor de P (Q) corresponde à concordância (discordância), dada pelo somatório do número de vezes em que cada valor é superior (inferior) aos valores seguintes. Os valores de T e Q são dados pelo número de valores repetidos em cada conjunto de dados (mas que não estão repetidos em ambos, ainda considerando a posição de cada valor no conjunto de dados).

A utilização de vários parâmetros estatísticos possibilita a análise do erro em diferentes formas, mas dificulta a tarefa de identificar o melhor desempenho. Uma forma de combinar esses diferentes parâmetros se dá pela utilização de gráficos do tipo radar, como sugerido por [Seegers *et al.* 2018]. Esses gráficos utilizam coordenadas polares, em que cada parâmetro assume um eixo. Ligando os pontos de cada eixo, formam-se áreas, que podem ser utilizadas como uma medida de desempenho [Tran *et al.* 2023]. No presente trabalho, uma nova métrica foi proposta com base em gráficos radar, chamada de *goodness of fit* (GoF). O valor de GoF é dado pelo produto entre a área do polígono gerado no gráfico e a distância entre o centroide do polígono e o centro da figura. Nesse sentido, a métrica pode ser vista como o volume de um prisma, cuja base é o polígono e a altura é dada pela distância entre centroide e centro. Os parâmetros escolhidos para o GoF foram: Kendall, MAE, MAPE, Bias e WR. Assim, tem-se métricas de correlação, acurácia (absoluta e percentual), viés e comparação direta dos resíduos. O cálculo de GoF é sensível aos valores dos parâmetros, que foram padronizados entre 0 (melhor desempenho) e 10 (pior desempenho). Os intervalos de valores máximos e mínimos utilizados para a padronização foram: Kendall = [0, 1], MAE = [0, 60], MAPE = [0, 800], bias = [0, 60] e WR = [0, 100]. Nesse formato, menores (maiores) valores de GoF indicam melhores (piores) desempenhos de cada combinação de correção atmosférica e algoritmo de turbidez ou MPS. Ademais, a aplicação do GoF pode ser feita diretamente para outras regiões e variáveis, já que o método se estende para qualquer comparação entre dados medidos e estimados.

Capítulo V: Artigo Científico

Para a obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Oceanologia, é requerido que o discente realize a submissão de pelo menos um artigo científico como primeiro autor em periódico com corpo indexado. Desse modo, os resultados da pesquisa desenvolvida durante o período de mestrado e a discussão dos resultados serão apresentados em forma de artigo neste Capítulo. O primeiro manuscrito, de autoria de Rafael Simão, Juliana Távora, Mhd. Suhyb Salama e Elisa Fernandes, é intitulado “*Optimizing Optical Coastal Remote-Sensing Products: Recommendations for Regional Algorithm Calibration*” e foi publicado no periódico “*Remote Sensing*” (disponível em doi.org/10.3390/rs16091497).



Article

Optimizing Optical Coastal Remote-Sensing Products: Recommendations for Regional Algorithm Calibration

Rafael Simão ^{1,*} , Juliana Távora ² , Mhd. Suhyb Salama ² and Elisa Fernandes ¹

¹ Programa de Pós-Graduação em Oceanologia, Instituto de Oceanografia, Universidade Federal do Rio Grande (FURG), Av. Itália km 8, Rio Grande 96203-900, RS, Brazil; fernandes.elisa@gmail.com

² Faculty of Geo-Information Science and Earth Observation, University of Twente, 7500 AE Enschede, The Netherlands; j.tavora@utwente.nl (J.T.); s.salama@utwente.nl (M.S.S.)

* Correspondence: rafael.avila.simao@gmail.com

Abstract: The remote sensing of turbidity and suspended particulate matter (SPM) relies on atmospheric corrections and bio-optical algorithms, but there is no one method that has better accuracy than the others for all satellites, bands, study areas, and purposes. Here, we evaluated different combinations of satellites (Landsat-8, Sentinel-2, and Sentinel-3), atmospheric corrections (ACOLITE and POLYMER), algorithms (single- and multiband; empirical and semi-analytical), and bands (665 and 865 nm) to estimate turbidity and SPM in Patos Lagoon (Brazil). The region is suitable for a case study of the regionality of remote-sensing algorithms, which we addressed by regionally recalibrating the coefficients of the algorithms using a method for geophysical observation models (GeoCalVal). Additionally, we examined the results associated with the use of different statistical parameters for classifying algorithms and introduced a new metric (GoF) that reflects performance. The best performance was achieved via POLYMER atmospheric correction and the use of single-band algorithms. Regarding SPM, the recalibrated coefficients yielded a better performance, but, for turbidity, a tradeoff between two statistical parameters occurred. Therefore, the uncertainties in the atmospheric corrections and algorithms used were analyzed based on previous studies. In the future, we suggest the use of in situ radiometric data to better evaluate atmospheric corrections, radiative transfer modeling to bridge data gaps, and multisensor data merging for compiling climate records.

Keywords: ACOLITE; atmospheric correction; coastal water; Landsat-8/OLI; ocean color; performance assessment; POLYMER; remote sensing; Sentinel-2/MSI; Sentinel-3/OLCI



Citation: Simão, R.; Távora, J.; Salama, M.S.; Fernandes, E. Optimizing Optical Coastal Remote-Sensing Products: Recommendations for Regional Algorithm Calibration. *Remote Sens.* **2024**, *16*, 1497. <https://doi.org/10.3390/rs16091497>

Academic Editor: Martin Gade

Received: 8 February 2024

Revised: 13 April 2024

Accepted: 16 April 2024

Published: 24 April 2024



Copyright: © 2024 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Estuaries and coastal lagoons are two types of coastal inland water bodies that share similarities and differences in terms of their formation processes and oceanographic characteristics [1]. However, both environments contain suspended particulate matter (SPM) [2,3], which is relevant to their water quality, biogeochemistry, and bottom morphology [4].

The attenuation of light throughout the water column and the consequent limitation of biological production [5] can be linked to the relationship between SPM and turbidity. Turbidity is an optical property that reflects the attenuation (commonly scattering) of light and depends not only on the concentration and characteristics of SPM (shape, size, and sediment type) but also on the incident light field and the absorption of colored dissolved organic matter (CDOM) [6]. If turbidity is considered a measure of light attenuation (such as for turbidimetry), then CDOM could enhance turbidity, as attenuation is the result of both scattering and absorption [6]. In contrast, if it is considered a measure of scattering (such as for nephelometry), then CDOM could reduce turbidity (as it absorbs light, with less light available for scattering), especially at shorter visible wavelengths [6,7]. However, at longer wavelengths, CDOM imposes a negligible influence.

Turbidity and SPM, often interchangeably employed, are considerably different in terms of how they are measured: SPM concentrations are determined gravimetrically [8],

whereas turbidity is commonly measured via the side scattering of red (or near-infrared (NIR)) wavelengths using a turbidimeter [6,9]. The negligible impact of CDOM absorption within the red–NIR spectral region renders turbidity measurements a reliable proxy for SPM concentration. This relationship is often effectively described through a linear model [2]; however, exceptions apply.

Traditional approaches for quantifying these parameters rely on in situ measurements of turbidity or SPM and usually involve costly, laborious, and time-consuming processes, limiting the study of the spatiotemporal variability in large areas and revealing associated uncertainties [8]. Since turbidity and SPM are associated with light scattering, however, they can be studied using remote sensing [10]. This alternative provides several advantages, allowing a synoptic view of large areas and frequent revisits at a low cost. However, various combinations of atmospheric corrections and algorithms could lead to different results, making the selection of the best combination for each study area and purpose a nontrivial task [11].

The initial challenge in applying satellite turbidity and SPM algorithms lies in the necessary atmospheric correction of remote-sensing products. The complete correction of atmospheric effects (considering both Rayleigh and aerosol scattering) is fundamental for remote-sensing estimations of these variables [12]. Traditional approaches have been developed for oceanic regions where the NIR water reflectance is negligible, and this part of the spectrum can be used to estimate the contribution of aerosols [13]. However, in coastal regions, up to 89% of the top-of-atmosphere reflectance in the NIR region may originate from in-water constituents [12]. In this case, the reflectance is not only due to aerosols but also due to SPM, and this requires a different approach [14–16]. Atmospheric corrections for coastal waters can be divided into several approaches, including dark spectral fitting [17], NIR (or shortwave infrared (SWIR)) [14] similarity spectrum [18], neural networks [19,20], radiative transfer modeling (as described by [21]), and spectral matching [16]. The advantages and disadvantages of all these methods have been described in the literature [20,22]. For example, ACOLITE [17] relies on dark spectral fitting (DSF) as a default option (alternatively, ACOLITE can use the SWIR similarity spectrum [14]) and exhibits lower spatial noise in R_w and derived products [22], while POLYMER [16] is based on a bio-optical model and spectral matching, providing the advantage of correcting sun glint and adjacency effects [23]. These differences introduce specificity into the application of atmospheric corrections [11]. Thus, the same correction can be identified as yielding a better or worse performance depending on the region studied, band used, or final product derived [20,22,24–26].

In addition, remote-sensing algorithms for turbidity and SPM data exhibit certain assumptions and limitations [9,27]. Algorithms can be generically divided into (i) empirical algorithms based on the relationship between the satellite reflectance and the variable of interest [28] and (ii) analytical and semi-analytical algorithms relying on the inherent optical properties of seawater and (for semi-analytical algorithms) a certain degree of empirical approximation [29,30]. Analytical or semi-analytical algorithms often consider standard optical properties and are, therefore, regarded as a more global approach. Empirical algorithms, however, could yield better results when adjusted to the area of interest [25] but should not be applied in regions other than those used in calibration [9,27]. The adjusting of algorithms requires in situ radiometric data that do not contain uncertainties resulting from atmospheric correction and might not be available for the study area. Therefore, an evaluation of turbidity/SPM satellite estimates is necessary because these estimates are more realistic (as the combination of atmospheric corrections and algorithms is evaluated) and because more accessible data (such as in situ turbidity and SPM data) are easier to obtain than reflectance data.

Both empirical and semi-analytical algorithms fail in regions with optical properties different from those used during calibration, which can be associated with the effect of other optical properties (such as CDOM [24]) and changes in specific scattering coefficients [31]. Moreover, reflectance becomes saturated in highly turbid waters, and the saturation inter-

val is defined by the characteristics of the suspended particles (mass-specific absorption and scattering coefficients) and by the wavelength (saturation occurs first at shorter wavelengths) [32]. To avoid saturation, some algorithms use a band-switching scheme that applies shorter wavelengths (red) for low reflectance and longer wavelengths (NIR) for high reflectance [2,33].

The regional calibration of algorithms is an alternative [10,34], combining the advantages of two distinct methodologies—a global and semi-analytical relationship between the reflectance and the variable of interest—combined with empirical adjustments to account for the specificity of the study area (related, for example, to the mass-specific coefficient [32]). Recalibration can be performed using satellite reflectance data, potentially improving the algorithm performance in regions with limited in situ radiometric data, with the disadvantage of adding uncertainty associated with the atmospheric correction process [10,34]. Additionally, spectral convolution is an important step when applying remote-sensing algorithms due to the spectral differences between hyperspectral (commonly used for algorithm development) and multispectral (most satellites) sensors [10]. Spectrally convoluted coefficients are specific to each satellite sensor [35].

The objective of this work was to explore the advantages and limitations of this combination (atmospheric corrections and algorithms for turbidity/SPM) and to provide tools for the accurate regional calibration of derived remote-sensing products. The study area is the Patos Lagoon (Brazil). The initial step of this evaluation was conducted by Távora et al. [36] using the Aqua/MODIS satellite, a single atmospheric correction [37], and three SPM algorithms [2,27,38]. Here, we expanded this assessment to other satellites, atmospheric corrections, and algorithms, providing valuable information on the uncertainty in each method and facilitating knowledge-based decisions for future studies. The task of identifying the best performance is sometimes subjective, as it depends on the statistical parameter used to rank the algorithms. To address this issue, we present a new metric (GoF) that summarizes multiple statistical parameters. Távora et al. also suggested that Patos Lagoon exhibits optical properties that differ from those considered in the semi-analytical algorithm of Nechad et al. [27]. Thus, the study area could serve as a case study for the regionality of turbidity and SPM estimates, which was addressed in previous works [10,34] by regionally recalibrating the coefficients of the turbidity algorithm for Landsat 5, 7, and 8. Therefore, we also provided regionally recalibrated coefficients specific to the study area, expanding this work to include SPM and other satellites, applying a more robust recalibration method, and examining the improvements and limitations associated with this approach.

2. Materials and Methods

2.1. Study Area

Patos Lagoon (Figure 1) is located on the southern coast of Brazil and is considered the world's largest choked coastal lagoon [39]. It is approximately 250 km long and 40 km wide and connected to the South Atlantic Ocean through a single narrow channel (width <700 m). Circulation is driven by winds and river discharge, as the channel functions as a lowpass filter, attenuating tides [40]. At high river discharge ($>2000 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$), the dynamics are controlled by the discharge, favoring freshwater flushing [41]. At low discharge ($<2000 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$), the circulation is mainly controlled by winds. South quadrant winds generate saline water inflow, while north-quadrant winds generate outflow [41].

SPM enters the system through three main tributaries: the Guaíba River, Camaquã River, and São Gonçalo Channel (which connects Patos Lagoon to Mirim Lagoon) [42]. High-input periods (common in winter and spring, as well as in El Niño years) lead to higher SPM concentrations, with the entire lagoon becoming turbid [36,42]. Low-input periods (common in summer and autumn and in La Niña years) lead to lower SPM concentrations, with river plumes restricted to the mouths of tributaries [36,42]. The mean SPM concentrations are approximately $38 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ in the innermost portion of the lagoon and approximately $10 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ in the lower estuary [3].

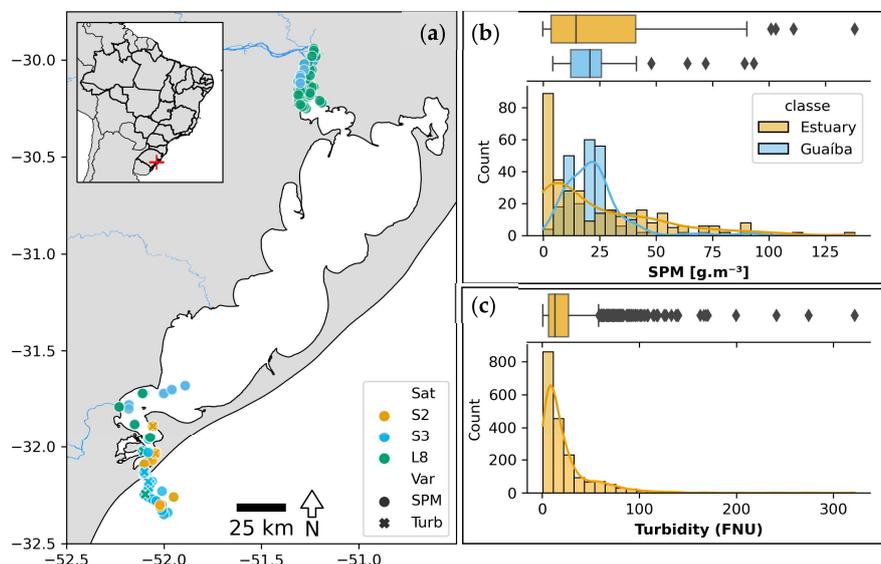


Figure 1. (a) Patos Lagoon (South Brazil) with in situ and satellite matchups for turbidity and SPM. Satellites are shown in different colors (orange, blue, and green indicate Sentinel-2 (S2), Sentinel-3 (S3), and Landsat-8 (L8), respectively), while SPM and turbidity matchups are marked with circles and crosses, respectively. The in situ data frequency distributions for (b) SPM and (c) turbidity are split into southern (estuary, in orange) and northern (Guaíba, in blue) areas of the lagoon.

Turbidity is one of the most important parameters for aquatic metabolism in the lagoon, altering light penetration and, thus, primary production [5]. A direct and linear relationship between turbidity and SPM has been observed in the region [43], allowing the use of turbidity as a proxy for SPM concentration. Furthermore, turbidity can be used to delimit Patos Lagoon coastal plumes using remote sensing [34]. Turbidity values in the Patos Lagoon estuarine zone usually range from 0 to 100 NTU but can exceed 300 NTU (Figure 1).

2.2. Data

2.2.1. In Situ Data

The in situ turbidity and SPM data for Patos Lagoon and the spatial and frequency distributions of the data are shown in Figure 1. In situ turbidity data were obtained from Brazilian Coast Monitoring System (SiMCosta; simcosta.furg.br/home) buoys RS1, RS2, and RS4 between 2016 and 2021. The buoys are located in the estuarine region of Patos Lagoon, and the 700 nm wavelength is used for measuring turbidity. Only data that passed the quality control tests (gross range test, spike test, rate of change test, and flat line test) were considered. This dataset was complemented by in situ turbidity measurements from various research projects in Patos Lagoon described in [44] (in preparation).

In situ SPM data were obtained from Távora et al. [45]. The database includes measurements conducted during different research projects between 1978 and 2019, covering the entire length of Patos Lagoon. The data passed quality tests [46], ensuring consistency. In this work, only measurements conducted in situ and close to the surface (depths up to 1 m) were considered.

2.2.2. Remote-Sensing Data

Scenes from satellites/sensors Landsat-8/Operational Land Imager (OLI), Sentinel-2 Multispectral Instrument (MSI), and Sentinel-3 Ocean and Land Color Instrument (OLCI),

hereinafter referred to as L8, S2, and S3, respectively, were obtained for the study area (swaths between 30.00°S and 52.75°W and 32.75°S and 50.30°W), covering the 2013–2022, 2016–2022, and 2016–2022 periods, respectively. For S2, only scenes with cloud coverage lower than 10% and tiles containing matchups with in situ data were considered. For S3, only scenes that covered the entire study area were considered. For L8, all available scenes were used.

2.3. Methods

2.3.1. Atmospheric Correction

Satellite scenes were further processed for atmospheric correction using two distinct methods, namely, POLYMER [16] and ACOLITE dark spectral fitting (DSF) [17]. This choice was based on previous comparisons of these two methods, showing that they have distinct spectral uncertainties [11] and performances for different final products [25]. In Patos Lagoon, previous works have applied ACOLITE [10,42] and POLYMER [34], but without a direct comparison of these methods. Additionally, [10] lists the advantages and limitations of each correction. Both methods were developed for coastal regions, and the main difference is the approach used for estimating the aerosol contribution. While POLYMER uses spectral matching between a polynomial and bio-optical model [47], ACOLITE identifies pixels and bands with negligible water reflectance (R_w) values. Additionally, POLYMER can perform atmospheric correction even with sun glint. A 20 m resolution was used for S2 in both atmospheric correction methods.

2.3.2. Matchups

Regarding turbidity, matchups were selected based on a maximum time difference of 30 min between the satellite overpass and in situ data acquisition times. Regarding SPM, data obtained on the same day were considered matchups, as the database does not provide temporal information. For each matchup, a 3×3 pixel window was extracted near the coordinates of in situ measurements. Pixels marked as invalid using atmospheric correction flags, negative reflectance values, or quality water index polynomial (QWIP) scores $> \pm 0.3$ were removed. The QWIP was developed by Dierssen et al. [48] and provides a metric for quality control of water reflectance data based on the apparent visible wavelength (AVW) [49] of diverse optical water types. Windows with a coefficient of variation (ratio of the standard deviation to the mean) greater than 0.2 and with less than 50% valid pixels (in this case, less than 5 pixels) were also excluded, following IOCCG recommendations [50]. The remaining windows were aggregated by the median, and the results were used in the turbidity and SPM algorithms. The number of available matchups depends on the atmospheric correction, algorithm, and band, ranging from 37 to 346 and from 18 to 101 for turbidity and SPM, respectively. The exact number of matchups for each combination is shown in Section 3.

2.3.3. Turbidity and SPM Algorithms

The turbidity algorithms used include those of Nechad et al. [9] and Dogliotti et al. [33] (hereafter referred to as N09 and D15, respectively), applied to the red (~ 665 nm for S2 and S3 and ~ 655 nm for L8) and near-infrared (~ 865 nm for the three satellites) bands. These algorithms were selected because they are widely applied in coastal regions and represent two distinct approaches: N09 is a single-band algorithm that may struggle with reflectance saturation, while D15 aims to contour saturation by switching between two bands (red and NIR). The N09 algorithm can be expressed as follows:

$$T = \frac{A \cdot R_w}{1 - R_w/C} \quad (1)$$

where T is the turbidity (in FNU), R_w is the water reflectance, and A and C are empirical coefficients defined by the author. The A coefficient is largely calibrated based on in situ measurements and controls the linear relationship between the reflectance and turbidity,

while the C coefficient is generally calculated based on standard optical properties and defines the saturation limit without impacting the linear regime. Spectrally convoluted coefficients for each satellite sensor were used (Section 2.3.4).

The D15 algorithm is based on the same equation but uses a switching mechanism. For Rw values lower than 0.05, the algorithm uses the red band, while for Rw values higher than 0.07, the infrared band is used. Between these values, both bands are used, applying a linear weighting function within the reflectance range. The original coefficients provided by the authors were used.

To estimate the SPM concentration, the algorithms employed were those of Nechad et al. [27], Novoa et al. [2], and Távora et al. [29], which are hereafter referred to as N10, N17, and T20, respectively. The N10 and N09 algorithms use the same equation (Equation (1)) but with different values for the A and C coefficients (again, spectrally convoluted coefficients were used). The N17 algorithm was developed for the Gironde Estuary (France) and contains a switching mechanism. It uses a linear model with the green band for low reflectance values, a linear model with the red band for intermediate reflectance values, and a polynomial with the near-infrared band for high reflectance values. Each band receives varying weights depending on the water reflectance and saturation interval.

Finally, the T20 algorithm is also based on Equation (1) but considers all available bands above 600 nm (except for the range between 670 and 700 nm, due to the chlorophyll fluorescence signal). In addition to the SPM concentration, the uncertainties in the SPM estimates are provided. In this work, only the bands between 630 and 850 nm were used, as these bands improved the algorithm performance. T20 also requires the sea surface temperature (SST) as input. Data from other instruments of the same satellites could be used (such as the Thermal Infrared Sensor, TIRS, for L8), but they are not available for all satellites used (S2 does not provide an SST product). Therefore, the SST was obtained from the Climate Change Initiative (SST CCI) L4 product. The SST CCI product was developed by Merchant et al. [51] and provides SST data obtained from different satellite sensors. The L4 product has a spatial resolution of $0.05^\circ \times 0.05^\circ$ with daily coverage, and it showed favorable agreement with the in situ SST data for Patos Lagoon (Figure A1). Because the spatial resolution of these images is coarser than that of the satellite sensors, the SST values for each pixel were assigned based on the closest value to the SST CCI data.

2.3.4. Convolution and Regional Recalibration Methods

The A and C coefficients (Equation (1)) provided for N09 and N10 [9,27] were convoluted through the relative spectral response (RSR) of the satellite sensors based on the protocol of Távora et al. [10] (https://github.com/julianatavora/High-resolution-satellites-primer-codes/tree/main/spectral_conv, accessed on 21 August 2023). This is an important step in adjusting the obtained coefficients via in situ radiometry to match the spectral characteristics of each satellite sensor.

Furthermore, to reduce the bias and better adjust the turbidity and SPM estimates for Patos Lagoon, a regional recalibration of the N09 and N10 coefficients was performed. Recalibration was performed using the GeoCalVal method [52], adapted for nonlinear models (Equation (1)). GeoCalVal allows calibration/validation datasets to be split objectively, creating different combinations of sets by using bootstrapping and jackknife sampling methods. As a result, the model provides the frequency distributions of the calibrated coefficients and validation metrics for different combinations of sets. The method was developed for the calibration and validation of geophysical observation models, and its applicability is not limited to the variables used here (SPM and turbidity) but extends to other cases (for example, to chlorophyll- a absorption and soil moisture, as in the paper that introduces the method [52]).

The median value of coefficient A (Equation (1)) and the statistical parameters (Section 2.3.5) were calculated. The C parameter in Equation (1) was fixed at the convoluted value for the S3A satellite (Table 1). Fixing the C value has been shown to improve performance. This could be explained by the fact that this coefficient controls the saturation

limit, as we did not observe a complete saturation curve in our data (Figure A2). To allow before-and-after comparison, the N09 and N10 algorithms using the original coefficients were also evaluated following the same method (i.e., using the same validation sets). The win rate (shown below) was calculated after calibration and validation using the entire dataset.

Table 1. Convoluted coefficients for the turbidity (N09) and SPM (N10) algorithms.

Satellite	Algorithm	Wavelength (nm)	A	C
L8	N09	655	242.27	0.1682
		865	2108.56	0.2115
	N10	655	304.30	0.1682
		865	2974.41	0.2115
S2A	N09	665	268.52	0.1725
		865	2107.81	0.2115
	N10	665	347.18	0.1725
		865	2974.24	0.2115
S2B	N09	665	270.20	0.1726
		864	2098.48	0.2115
	N10	665	349.33	0.1726
		864	2961.96	0.2115
S3A	N09	665	281.95	0.1729
		865	2116.68	0.2115
	N10	665	358.57	0.1729
		865	2986.40	0.2115
S3B	N09	665	281.49	0.1729
		865	2114.65	0.2115
	N10	665	357.753	0.1729
		865	2983.70	0.2115

2.3.5. Statistical Parameters

Based on Seegers et al. [53], five statistical parameters were used to evaluate the performance of the different combinations of atmospheric corrections and turbidity/SPM algorithms: Kendall's tau correlation coefficient, root-mean-square error (RMSE), mean absolute error (MAE), mean absolute percentage error (MAPE), and bias.

$$RMSE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{i=n} (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (2)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{i=n} (\hat{y}_i - y_i) \quad (3)$$

$$MAPE(\%) = \frac{100}{n} \cdot \sum_{i=1}^{i=n} \frac{(\hat{y}_i - y_i)}{(y_i)} \quad (4)$$

$$Bias = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{i=n} \hat{y}_i - y_i \quad (5)$$

where n is the number of matchups for each algorithm and y and \hat{y} are the measured and estimated variables (turbidity or SPM), respectively.

The win rate (WR) was also used as a statistical parameter because it directly compares residuals and provides a way of classifying algorithm performance [53,54]. For each pair of algorithms, the winning percentage was calculated (one algorithm receives a win when its residual is lower than that of the other). This process was performed for all algorithm combinations. Finally, the WR of each algorithm was obtained as the average winning

percentage between all combinations. For a given Algorithm A, WR can be expressed as follows:

$$WR_A(\%) = \frac{1}{C_{m,2}^A} \cdot \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^m \frac{100}{n} \sum_{j=1}^{j=n} \begin{cases} 1, & \text{if } residual_{A,j} < residual_{B,j} \\ 0, & \text{if } residual_{A,j} > residual_{B,j} \end{cases} \quad (6)$$

where $C_{m,2}^A$ is the number of combinations with two elements that contain Algorithm A, m is the number of algorithms, A and B are two different algorithms, n is the number of simultaneous matchups between A and B , and the residual is the difference between the algorithm estimate and in situ measurement.

Given the diversity of metrics and ways to rank the performance, a robust alternative is to use radar plots to calculate the area associated with each approach [55]. Here, we adopted the product between the radar plot area and the distance between the centroid and plot center as a metric of the goodness of fit (GoF), as shown in Figure 2. This new metric (hereafter referred to as GoF) favors both the best overall performance (smallest area) and the most balanced performance (the centroid is closest to the center). The selected statistical parameters considered by GoF provide metrics for correlation (nonparametric Kendall correlation coefficient), accuracy (MAE and MAPE, given absolute and relative errors, respectively), bias (allowing identification of over- or underestimation), and comparative performance (WR, pairwise comparison of the residuals). The RMSE was not considered, to avoid redundancy with the MAE, because it is not designed for nonnormal statistical distributions [53]. All the parameters were scaled between 0 (best performance) and 10 (worst performance) based on values close to the minimum and maximum (Kendall = [0, 1], MAE = [0, 60], MAPE = [0, 800], bias = [0, 60], and WR = [0, 100]). Thus, the lowest GoF values indicate the best combination of atmospheric correction and algorithm for each remote-sensing product. The specific formulas applied to calculate GoF are those of the statistical parameters (Equations (3)–(6)), the area and centroid of a polygon, and the feature scaling of the parameters. Thus, GoF can be applied to any comparison between measured and estimated data (including other optical remote-sensing products and chlorophyll- a and CDOM). The Supplementary Material provides a Python script to estimate GoF using some example data.

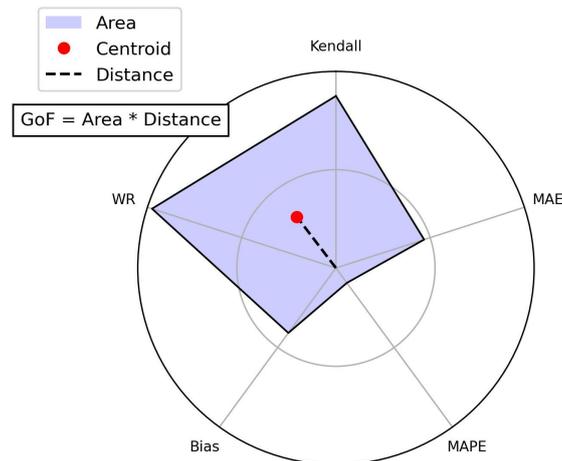


Figure 2. Radar plot with the selected statistical parameters (Kendall, MAE, MAPE, and WR). The resultant polygon area (in blue), centroid (red circle), and distance between the radar plot center and polygon centroid (dashed black line) are represented. The goodness of fit (GoF) metric summarizes the algorithm performance and is given by the product of the area and distance.

3. Results

3.1. Performance of the Different Combinations of Atmospheric Corrections and Algorithms

The spectral convoluted coefficients from N09 and N10 for the L8, S2, and S3 satellites and the red and NIR bands are provided in Table 1.

The statistical parameters for each of the satellites, atmospheric corrections, and turbidity algorithms are shown in Figure 3 (the radar plots are shown in Figure A3). The best performance was associated with percentage uncertainties (measured via MAPE) between 27% and 42%, with MAE values between 10 and 11 FNU. The MAPE allows us to rank the algorithms based on the normalized accuracy, which does not occur with the MAE. In cases with higher (lower) in situ concentrations, it is expected that the errors measured by the MAE will also be greater (less). For the three satellites, the best combination of atmospheric correction and algorithm (according to MAPE) was POLYMER and N09, differing only in the band used (655 nm for L8 and 865 nm for S2 and S3).

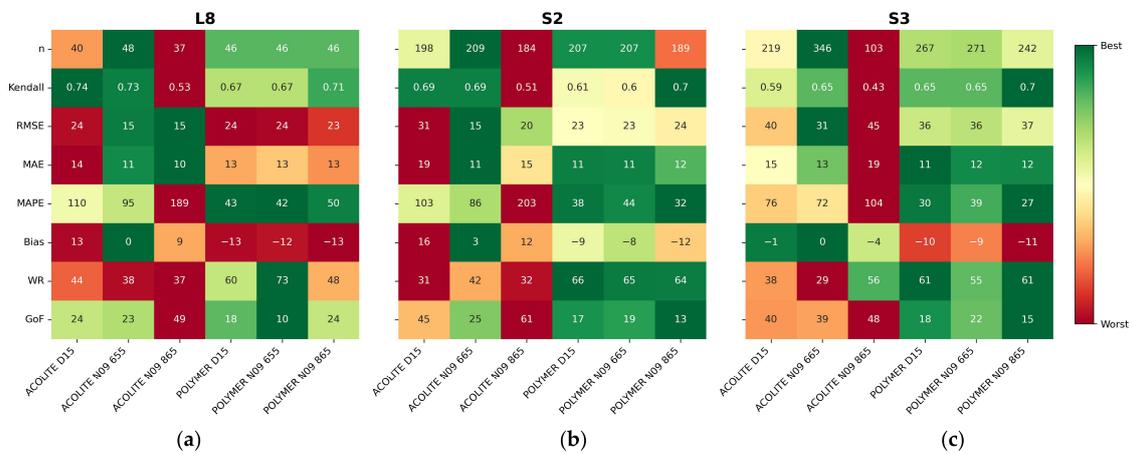


Figure 3. Heatmaps of the turbidity algorithm performance, given in FNU (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR) for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The best (worst) performance is shown in green (red).

The performance of the SPM algorithms is shown in Figure 4 (refer to Figure A4 for the radar plots) and was, in general, not as satisfactory as that of the turbidity algorithms. The lower MAPE for each satellite varied between 68% and 81%, with MAE values between 10 and 12 $g \cdot m^{-3}$. Again, the best combination (according to MAPE) was POLYMER atmospheric correction and a single-band algorithm (N10, with the 865 nm band for L8, the 665 nm band for S3, and the same performance for the S2 bands).

The win rate (WR) offers another way to rank the performance (as in Pahlevan et al. [11]) through the direct comparison of the residuals. Regarding turbidity and SPM, the best WR was assigned to the same combination as for the MAPE (POLYMER and N09; POLYMER and N10). As an exception, the best performance changed for S2, from N09 and N10 to D15 and N17, respectively. Additionally, the best band for S3 ranged from 665 to 865 nm, corresponding to the same WR values as those for D15 and N17. The differences between the best performance values of MAPE and WR reflect the distinction between comparing the algorithms with all the estimates (as via MAPE) and only in cases where both have valid results (as via WR). WR does not consider the amplitude of the residuals, so a high WR value can be related to a high MAPE value in cases where the algorithm performs well in most cases but fails and exhibits large errors in a few cases. For S2 and S3, the high WR for the band-switching algorithms (D15 and N17) indicates the efficiency of this mechanism in choosing the ideal band for each reflectance interval in most cases,

as it aims to avoid saturation and benefits from the better sensibility of shorter (longer) wavelengths to lower (higher) turbidity and SPM values [56]. Additionally, this advantage may be more notable in cases with higher turbidity and SPM variability, as observed in the Patos Lagoon estuary, which constitutes most of the matchups for S2 and S3 (Figure 1).

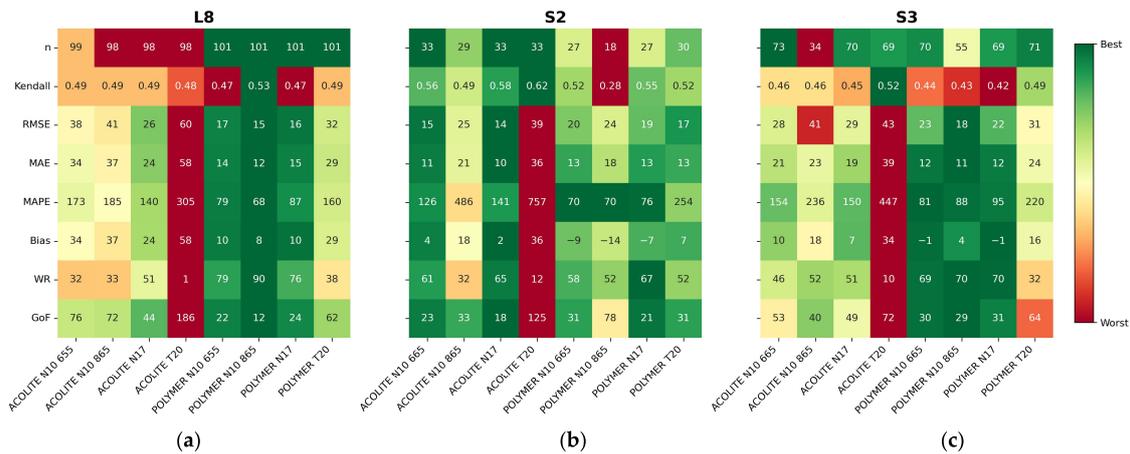


Figure 4. Heatmaps of the SPM algorithm performance, given in $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR) for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The best (worst) performance is shown in green (red).

In addition to the MAPE and WR, it is important to measure the degree of under- or overestimation by the bias. The algorithms using POLYMER underestimated turbidity (negative bias), while the algorithms using ACOLITE overestimated turbidity (positive bias, except for S3), as shown in Figure 5, where the estimates using POLYMER (ACOLITE) are usually below (above) the 45° line. This pattern was not clearly observed for the SPM algorithms (Figure 6), which may reflect the theoretical differences between these two variables, as turbidity does not depend only on the SPM concentration but also on the size, composition, and shape of particles. Figure 6c,f also show large errors for SPM estimates using the S3 satellite and N10, N17, and T20 algorithms. This is possibly caused by the adjacency of land pixels and the sensor's lower spatial resolution, as discussed in Section 4.2.

Regarding T20, almost all the metrics showed high uncertainty when using ACOLITE (Figure 4), with the SPM concentration overestimated when using this atmospheric correction (Figure 6). This could be attributed to the broader range of bands used by T20 to estimate SPM, as the spectral uncertainty in the atmospheric correction procedure can propagate and lead to unrealistic results when algorithms that depend on several bands are applied (as in the classification of optical water types [20]). POLYMER and ACOLITE represent two distinct approaches (spectral matching and dark spectral fitting, respectively) that may lead to different atmospheric correction spectral errors (as described by [22]). For Patos Lagoon, the results obtained using POLYMER and T20 (Figure 4) suggest that this atmospheric correction provides more realistic spectra, with lower uncertainty in R_w and better SPM estimates than those of ACOLITE.

The different statistical parameters led to different interpretations of the best combination of atmospheric correction, algorithm, and band (Figures 3 and 4). This task was simplified by analyzing the GoF metric, which provides a summary of the selected parameters (Figure 2). Table 2 lists the best combinations for estimating turbidity and SPM based on GoF; these combinations were mostly associated with POLYMER, except for SPM estimates using S2.

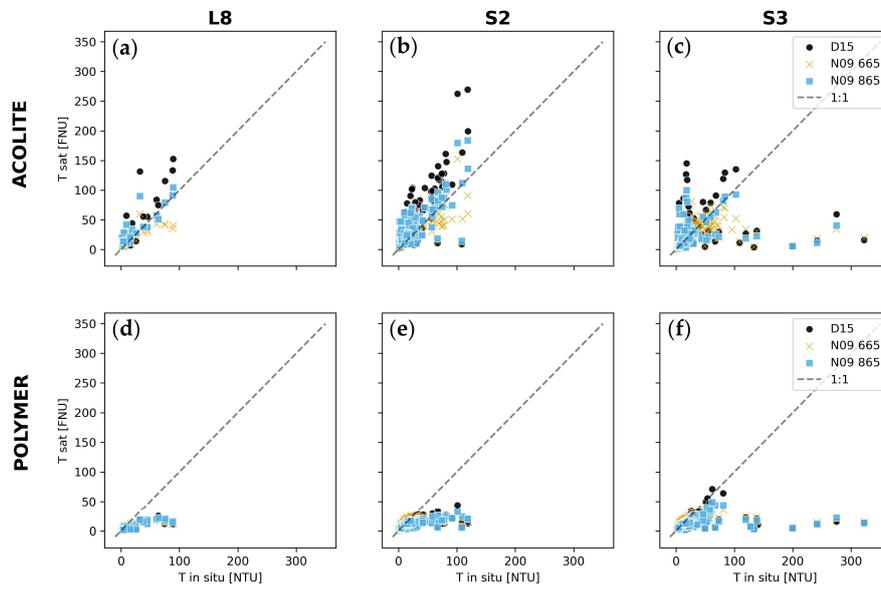


Figure 5. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated turbidity values for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and S3 (c,f), and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and POLYMER (d–f). For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (D15 and N09) and bands (665 and 865 nm) are shown.

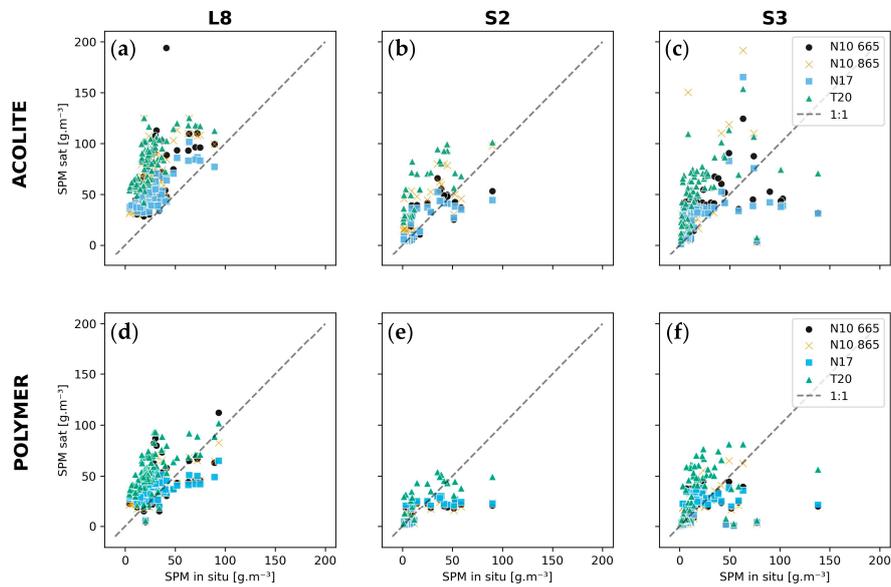


Figure 6. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated SPM concentrations for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and S3 (c,f), and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and POLYMER (d–f). For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N10, N17, and T20) and bands (665 and 865 nm) are shown.

Table 2. Best combinations of atmospheric correction (AC), algorithm (Alg), and band for each satellite and product based on the GoF metric.

Sat	Product	AC	Alg	Band	Strengths	Pitfalls
L8	Turbidity	POLYMER	N09	655	MAPE, WR	RMSE, Bias
	SPM	POLYMER	N10	865	All	-
S2	Turbidity	POLYMER	N09	865	Kendall, MAPE	RMSE, Bias
	SPM	ACOLITE	N17		All	-
S3	Turbidity	POLYMER	N09	865	Kendall, MAPE, WR	RMSE, Bias
	SPM	POLYMER	N10	865	RMSE, MAE, WR	Kendall

3.2. Regional Recalibration of Coefficients

The validation statistical parameters for turbidity and SPM are shown in Figures 7 and 8, respectively (the radar plots are shown in Figures A5 and A6, respectively). The recalibrated A coefficients for all satellites (L8, S2, and S3), atmospheric corrections (ACOLITE and POLYMER) and bands (665 and 865 nm) are listed in Table A1.

The turbidity test results indicated that for five of the cases, recalibration led to better performance (lower GoF value in Figure 7). In general, this improvement was not followed by a change in the accuracy (RMSE, MAE, and MAPE) of the algorithms but rather a reduction in bias. This phenomenon is shown in Figure 9, where the estimates (especially those using POLYMER) are closer to the 1:1 line.

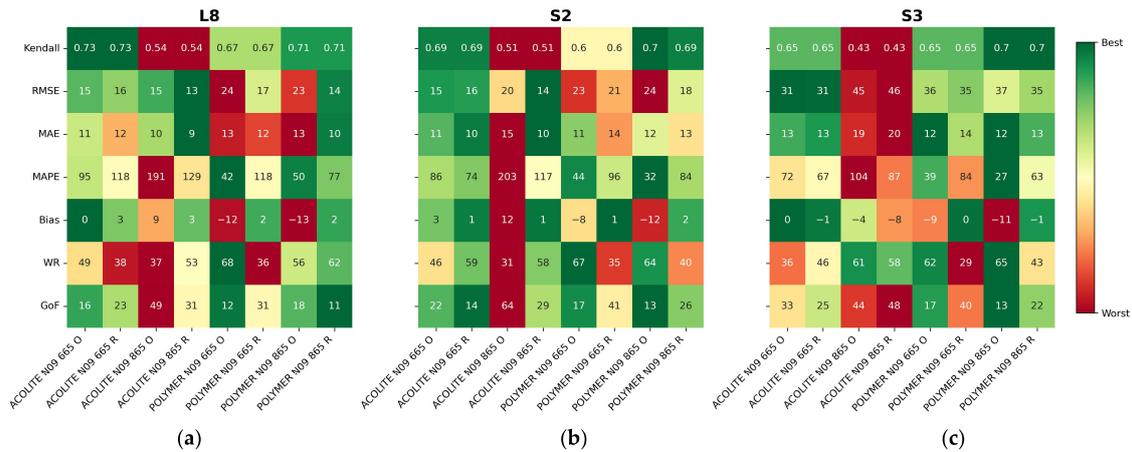


Figure 7. Heatmaps of the performance of the turbidity N09 algorithm using original (O) and recalculated (R) coefficients for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The results are given in FNU (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR). The best (worst) performance is shown in green (red).

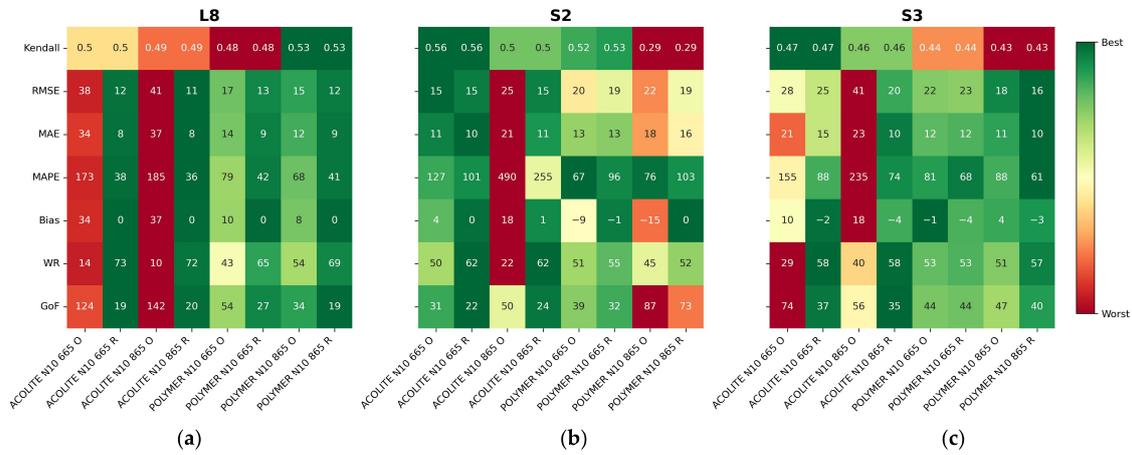


Figure 8. Heatmaps of the SPM N10 algorithm performance using the original (O) and recalculated (R) coefficients for satellites (a) L8, (b) S2, and (c) S3. The results are given in $g \cdot m^{-3}$ (RMSE, MAE, and bias) or percentage (MAPE and WR). The best (worst) performance is shown in green (red).

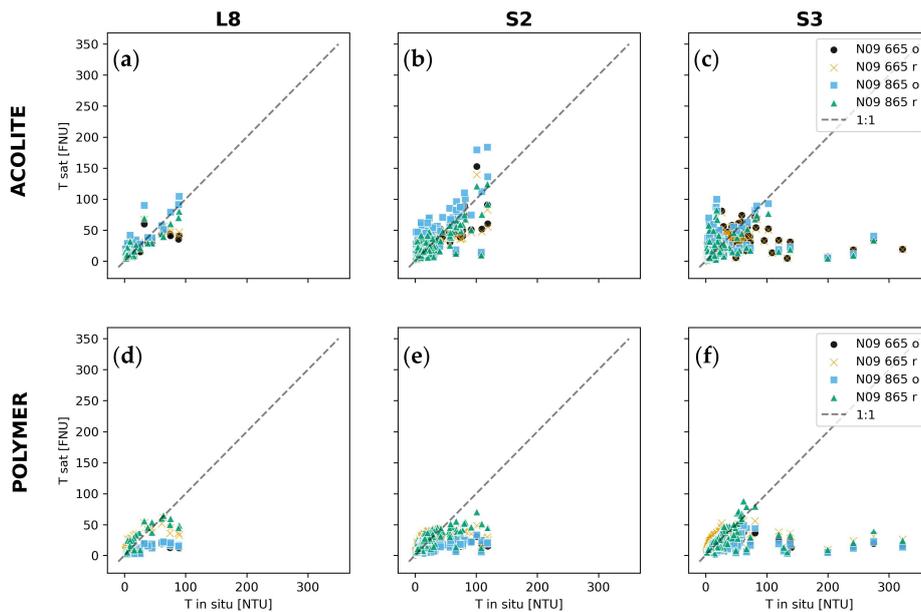


Figure 9. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated turbidity values for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and (c,f) S3, and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and (d–f) POLYMER. For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N09) and bands (665 and 865 nm) are shown with the original (o) or recalibrated (r) coefficients.

However, for seven of the combinations, the GoF metric shown in Figure 7 increases after recalibration, which could be attributed to a better fit for high- or low-turbidity data points. As the GeoCalVal method samples from the full range and the lowest values represent most of the data (refer to the data points with a turbidity lower than 40 FNU in Figure 9), an expected result is that the final coefficient is better suited for estimating the

lowest values. This led to a worsening in the estimates of the highest turbidities, causing the GoF value to increase for the S3-ACOLITE-N09-865 nm combination (Figure 7). However, this was not the case for most combinations because the high turbidity data points pushed the least square fit toward higher coefficients. In this way, the performance decreased at the lowest turbidities but improved at the highest turbidities. As a result, for most of the cases shown in Figure 7, the GoF metric increases after recalibration, indicating that this approach was ineffective at improving the turbidity estimates in these cases.

However, with regard to the SPM estimates, recalibration led to improvements in the performance of most of the algorithms (Figure 8) and the estimates were closer to the 1:1 line (Figure 10). As an exception, the S3-POLYMER-N10-665 nm combination did not yield an improvement. Nevertheless, in this case, the performance was the same as that before recalibration. This is associated with the same pattern described previously, with a better fit at low SPM concentrations.

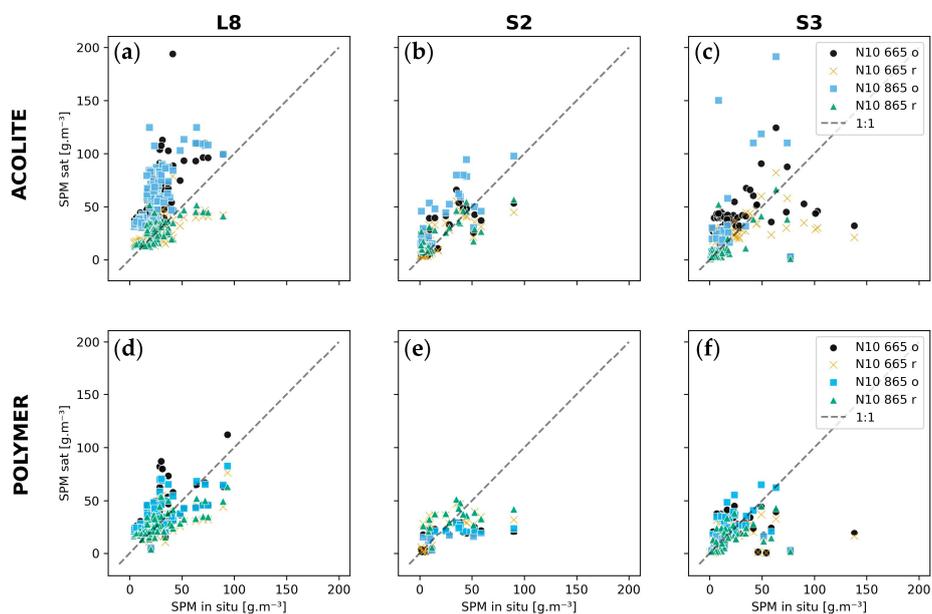


Figure 10. Scatter plots showing the relationships between the measured and estimated SPM concentrations for satellites (a,d) L8, (b,e) S2, and (c,f) S3, and atmospheric corrections from (a–c) ACOLITE and (d–f) POLYMER. For each satellite and atmospheric correction, multiple algorithms (N10) and bands (665 and 865 nm) are shown with the original (o) or recalibrated (r) coefficients.

Table 3 lists the recommended combinations of atmospheric corrections, bands, and coefficients for estimating turbidity and SPM in Patos Lagoon. The SPM algorithm provided an encouraging result in terms of recalibration: the regionally recalibrated coefficients (shown in bold font in Table 3) provided better results than the original coefficients in all the cases. Despite the better performance of N17 for S2 (Table 2), the N09 algorithm was recommended (Table 3) because it provided similar values for the statistical parameters but a lower MAPE value.

Figure 11 shows the mean SPM concentration in the Patos Lagoon estuary based on all S2 scenes, ACOLITE atmospheric correction, the N10 algorithm, and the red band (665 nm). The concentrations obtained using the original coefficients (Figure 11a) were consistently higher than those obtained with the recalibrated coefficients (Figure 11b). If we consider an optical depth of 1 m for the red band (as in [56]), then the total SPM mass (sum of the concentration of all pixels multiplied by the pixel volume) is 2.78×10^4 tons and

2.33×10^4 tons for the original and recalibrated coefficients, respectively. This resulted in a difference of 4.53×10^3 tons, illustrating the impact caused by not regionally calibrating the coefficients, especially considering the importance of SPM in coastal management.

Table 3. Best combinations of atmospheric corrections (ACs), algorithms (Alg), bands, and coefficients (A and C) for each satellite and product based on the GoF metric. Regionally recalibrated coefficients are shown in bold font.

Sat	Product	AC	Alg	Band	A	C	Strengths	Pitfalls
L8	Turbidity	POLYMER	N09	865	6435.35	0.2115	All	-
	SPM	ACOLITE	N10	655	136.11	0.1729	RMSE, MAE, MAPE, WR	Kendall
		POLYMER	N10	865	2272.39	0.2115	All	-
S2	Turbidity	POLYMER	N09	865	$\frac{2107.81 \text{ (S2A)}}{2098.48 \text{ (S2B)}}$	0.2115	RMSE, Bias	Kendall, MAPE
	SPM	ACOLITE	N10	665	292.43	0.1729	All	-
S3	Turbidity	POLYMER	N09	865	$\frac{2116.68 \text{ (S3A)}}{2114.65 \text{ (S3B)}}$	0.2115	Bias, RMSE	Kendall, MAPE, WR
	SPM	ACOLITE	N10	865	1033.23	0.2115	All	-

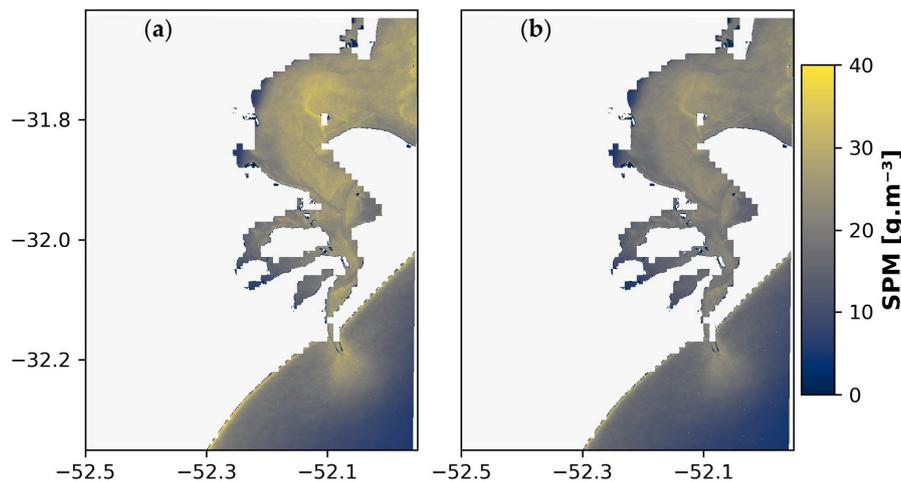


Figure 11. Mean SPM concentration in the Patos Lagoon estuary based on S2 scenes, ACOLITE atmospheric correction, the N10 algorithm, the 665 nm band, and (a) original or (b) regionally recalibrated coefficients.

4. Discussion

4.1. Previous Studies of Patos Lagoon and Results without Regional Recalibration

Previous studies on turbidity in Patos Lagoon based on remote sensing focused on applying algorithms to study the plume [34,57] and water quality in the region [10]. For the L8 and S2 satellites, POLYMER atmospheric correction and N09-recalibrated coefficients [34] achieved better performance in the NIR band (based on Kendall's tau correlation coefficient). Compared to [10], who used Landsat 5, 7, 8, and 9 satellites and ACOLITE atmospheric correction, the results of [34] indicated that POLYMER yields better performance for Patos Lagoon. In this study, the GoF metric was applied and the best performance for estimating turbidity was associated with POLYMER atmospheric correction and the NIR band, following these studies.

Regarding SPM, previous works focused mainly on its dynamics in the region, investigating its variability as a function of circulation [58], wind and river discharge [3],

interannual variability associated with ENSO cycles [36], and input from tributaries [42]. Two of these studies focused on evaluating SPM algorithms for the region.

Bortolin et al. [42] evaluated the performance of SPM estimates using Landsat 5, 7, and 8 satellites, ACOLITE atmospheric correction, and the T20 algorithm. Based on the same database used in this study [45], the authors obtained $RMSE = -37 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $MAPE = 79\%$. This performance was better than that obtained in this study for L8 ($RMSE = 60 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$, $MAPE = 305\%$), showing underestimation of the SPM concentration (in contrast to the overestimation found here). This could be explained by the methodological differences involved, especially the larger number of matchups used here ($n = 98$ vs. $n = 47$ for Bortolin et al.), which led to greater (and more realistic) optical and SPM variability, a more challenging estimate, and, thus, poorer performance. Additionally, differences between the studies regarding the versions of ACOLITE, sources of sea surface temperature data (important to the T20 algorithm for estimating water absorption), and sensors may cause these differences.

Távora et al. [36] used the Aqua/MODIS satellite and compared three SPM algorithms (N10, N16, and HAN16 [38]), with atmospheric correction from [37]. Their results indicated that the best performance was associated with switching the band algorithms (N17 and HAN16). Among the multiband algorithms, N17 was identified as the best ($RMSE = 14.6 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $MAPE = 36.9\%$). In this study, the N17 algorithm was identified as the algorithm with the best performance for S2 using ACOLITE. However, Távora et al. reported a better performance than that obtained in this study using S3, which has spatial and temporal resolutions closer to those of Aqua/MODIS ($RMSE = 22 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ and $MAPE = 95\%$) for the S3-POLYMER-N17 combination. Távora et al. used a much larger dataset ($n = 1241$ against $n = 69$ used here), which was mainly obtained from turbidity in situ measurements and converted into SPM. As turbidity can be more easily estimated (compared to SPM, Figures 3 and 4), this difference may explain the better performance. Again, differences related to the atmospheric correction, sensors, temporal coverage, and matchup selection (especially the window size and maximum time and distance difference allowed) may also have contributed to the findings.

Moreover, the spatial variability in the algorithm performance cannot be overlooked. Both Bortolin et al. [42] and Távora et al. [36] reported higher accuracy (lower RMSE and MAPE) for the Guaíba region. Távora et al. [36] showed that different algorithms performed better in the estuarine (HAN16) and Guaíba (N17) regions, with larger differences between the algorithms in the central part of the lagoon (reaching approximately $10 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$). The central region of Patos Lagoon represents a data gap in this study (Figure 1). The lack of information is one of the issues in the study area, with a large number of studies focusing on the estuarine region but only a few focusing on the limnic portion [59].

4.2. Regional Recalibration and Sources of Uncertainty

The results before recalibration showed an unsatisfactory performance for the algorithms in the study area. We addressed this poor performance by regionally recalibrating the empirical coefficients of N09 and N10, leading to bias reduction, although a trade-off between MAE and bias was observed. The need for recalibrating coefficients may be associated with uncertainties in atmospheric correction (as orbital data were used here) and the optical properties of Patos Lagoon (which may differ from those used during the calibration of the original coefficients).

Adjacency effects are associated with surfaces with contrasting reflectance, where photons from the higher reflectance surface (usually the land) are scattered into the instantaneous field of view (IFOV) of the sensor, mixing with the signal from the lower reflectance surface (usually water) [60]. This effect depends upon the characteristics of the atmosphere (aerosol optical depth), the target (water reflectance), and the background (land cover's albedo) [60–62]. Paulino et al. [62] evaluated adjacency effects on Brazilian inland waters, showing that this effect is relevant for distances between 0.1 and 2 km from land. On the other hand, Bulgarelli and Zibordi [61] observed adjacency effects up to a

few tens of kilometers from the coast. According to them, adjacency introduces a bias into remote-sensing reflectance, with a magnitude that depends on the atmospheric correction applied. For ACOLITE, adjacency effects could cause an overestimation of the SPM concentration, as already observed by Renosh et al. [26] for the Gironde Estuary due to the proximity between land pixels and automated turbidity stations. This approach is relevant considering the narrow channel that connects Patos Lagoon to the Atlantic Ocean (Figure 1). Regarding POLYMER, the atmospheric correction is based on the residual between R_w (given by a bio-optical model) and the Rayleigh-corrected reflectance [16]. This approach aims to correct for sun glint, but adjacency effects are also included in the residual and can thus be corrected via POLYMER [23]. In contrast, the underestimation of turbidity and SPM by POLYMER may reflect the restriction imposed by its bio-optical model [22]. In the present work, turbidity and SPM estimates using the NIR band (865 nm) were not systematically overestimated, as would be expected in the presence of adjacency effects [62]. Hence, one may consider that adjacency did not significantly affect the estimates.

Nevertheless, Figure 6c,f showed large errors for SPM estimates using the S3 satellite and N10, N17, and T20 algorithms. Most of the under- or overestimated points in Figure 6c,f are from the channel that connects Patos Lagoon to the ocean (Figure 1), suggesting that these points may be affected by the adjacency of land pixels. The S3 spatial resolution (300 m) contributes to this explanation, given that the narrowest part of the channel is 500 m wide and the matchups were extracted using a 3×3 -pixel window. This effect was less evident for the POLYMER atmospheric correction (Figure 6f), for which two possible reasons arose: (i) POLYMER might have corrected for adjacency effects [23]; (ii) some of the matchups using POLYMER were excluded based on the quality control flags (invalid pixels, large window variability, negative water reflectance, and QWIP).

The effect of the sensors' spatial resolutions (20, 30, and 300 m, respectively, for S2, L8, and S3) on the accuracy of the estimates was not investigated here, as it would involve isolating the effect of spatial sampling. The study of Pahlevan et al. [63], for example, found differences of up to 18% in the reflectance obtained from sensors with distinct spatial resolutions (OLI, MODIS, and VIIRS). According to the authors, this can be attributed to the footprint size (and associated sensor viewing angle) and to in-water variability. Dorji and Fearn's [64] studied turbid waters in northern Western Australia and found that the in-water variability may cause an underestimation of SPM concentration by lower resolution sensors (such as MODIS) due to intrapixel variability. On the other hand, Luo et al. [12] found overestimated turbidity estimates in lower-resolution sensors in the Gironde Estuary, caused by pixel contamination by land and muddy shallow waters. These results show that the bias introduced by the spatial resolution differences depends on the target's background (i.e., the water variability around the in situ measurements).

The atmospheric corrections with a better performance were not always the same for the red and NIR bands, which could be explained by the spectral errors of each method [22]. This introduces additional complexity to the choice of the best atmospheric correction, especially for band-switching algorithms (D15 and N17). Renosh et al. [26] faced the same problem in the Gironde Estuary, obtaining a better performance associated with different corrections for the red and NIR bands for S3. The authors used the N17 algorithm and chose the atmospheric correction with better performance in the NIR band, since most of the SPM range in the study area was estimated using this band.

Regarding optical properties, algorithms commonly assume a fixed value for specific backscattering coefficients [9,27]. However, this coefficient varies according to the size, shape, and composition of particles [31]. In some cases, as observed by Mabit et al. [24] in Québec coastal waters, there may be an inverse relationship between the mass-specific coefficient and SPM concentration, rendering remote-sensing estimates of SPM unfeasible. For Patos Lagoon, this variability is probably associated with differences in the characteristics of the material supplied by its tributaries. This explains the spatial variability in the algorithm performance observed in previous studies. Variability in the structure of phytoplankton communities [65] and in the production of particulate material by these

organisms [66] may also be relevant factors. Organic particles, for example, have been associated with lower backscattering coefficients in other regions (e.g., in the Arctic Ocean [67]). The influence of CDOM on SPM estimates should also be considered. Although its effect at longer wavelengths is often considered negligible [27], Mabit et al. [24] reported a positive correlation between the residuals of an SPM algorithm and CDOM absorption, with an increase (decrease) in CDOM absorption associated with an underestimation (overestimation) of the SPM concentration. However, their study revealed a case with a low SPM concentration (mostly less than $10 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$), and CDOM optically dominated waters.

The saturation of R_w at high turbidity and SPM concentrations is another challenge facing algorithms [32]. In theory, the absence of saturation in the data (Figure A2) favors the use of single-band algorithms (as in [24]), while moderate SPM concentrations (between 10 and $60 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$; Figure 1) favor the use of the red band (the ideal bands for each concentration interval are reported in [56], a study of the Rhone River and its plume). In this study, the best performance was obtained with single-band algorithms (N09 and N10). However, the red band did not perform better than the NIR band, possibly revealing the influence of high turbidity and SPM values on statistical parameters.

Within this context, the RMSE values were consistently greater than the MAE values. The RMSE is not recommended for cases where the data are not normally distributed, which may lead to an underestimation of the algorithm performance [53,68]. Regarding the S3 turbidity estimates (Figures 3 and 5), a group of data points with high turbidity and low reflectance amplified the negative bias of the N09 algorithm estimates, causing an increase in the values of several parameters (RMSE, MAE, and MAPE). Additionally, the various statistical parameters led to different results for the best performers for each satellite. A novel GoF metric (Figure 2) was proposed here and was shown to be a reliable answer to this problem, allowing objective classification of the performance. Thus, this metric is recommended for future studies and can be directly applied to other algorithms and regions. Attention must be given to the normalization of statistical parameters (maximum and minimum values considered), as the resultant polygon is sensitive to these values.

We also highlighted the importance of using the GeoCalVal method. Regarding S2 and SPM, only a few matchups were available. A simple calibration approach (randomly splitting the data into fractions of 70% and 30% as calibration and validation datasets, respectively) could lead to high uncertainty in the calibrated coefficients (different datasets could yield different results). GeoCalVal, however, provides the opportunity to analyze all combinations. For N09 and N10, the statistical parameters obtained using the entire dataset (Figures 3 and 4, respectively) were very close to those obtained using GeoCalVal (Figures 7 and 8, respectively), indicating the robustness of the method.

However, there are still uncertainties that remain unidentified. An ideal scenario would be to use in situ radiometric data to directly evaluate atmospheric corrections and measure optical properties in the study area. Theenathayalan et al. [25] studied Vembanad Lake and suggested the following possible path: the low availability of field data was overcome by using a simulated reflectance dataset for the study area based on a radiative transfer model. The data were used to develop regional algorithms for chlorophyll-a and SPM concentrations, which outperformed previously established algorithms. Unfortunately, this approach relies on in situ reflectance and optical property data (absorption and scattering) to calibrate the radiative transfer model, which were unavailable in this study.

Differences in the performances of SPM algorithms between Patos Lagoon's South and North parts (Guaíba and Estuary in Figure 1, respectively) had already been observed in previous works (as discussed in Section 4.1); they affect the regional recalibration of the coefficients. Figure 12 shows the SPM frequency distribution of all available in situ and satellite derived data (including those that are not matchups), estimated using the best combination for each satellite (Table 3). For optimally adjusted estimates, the distributions should show a similar pattern (e.g., [10]). However, the distributions in Figure 12 do not match exactly, indicating differences regarding the characteristics of the particulate matter throughout Patos Lagoon. A robust alternative would be to locally recalibrate the

coefficients, treating the Guaíba and estuarine regions (Figure 1) independently, but the number of available matchups in the present work is insufficient (0 to 94 for the Guaíba, and 7 to 59 for the estuary). For the central portion, all available in situ SPM data are from before 2013 and, therefore, before the satellites were launched (2013 for L8, 2015 for S2A, and 2016 for S3A). Patos Lagoon is part of a long-term monitoring project [69], and the SiMCosta program provides measurements taken by moored buoys, but these data are limited to the estuary and the number of measurements synchronous to the satellites' overpasses is still small. This limitation could be overcome by continuous and spatially distributed monitoring along the lagoon continuum. The Gironde Estuary is a positive example, with high-frequency water quality measurements taken by the MAGEST program [70] being useful for ocean color studies [12]. Automated stations for radiometric data acquisition (such as the AERONET-OC [71]) and global in situ datasets (such as GLORIA [72]) are also alternatives, but some regions (including Patos Lagoon) might be undersampled. Moreover, the large dimensions of Patos Lagoon (about 250 km long) and the financial difficulties found in developing countries currently limit a more complete evaluation of remote-sensing estimates.

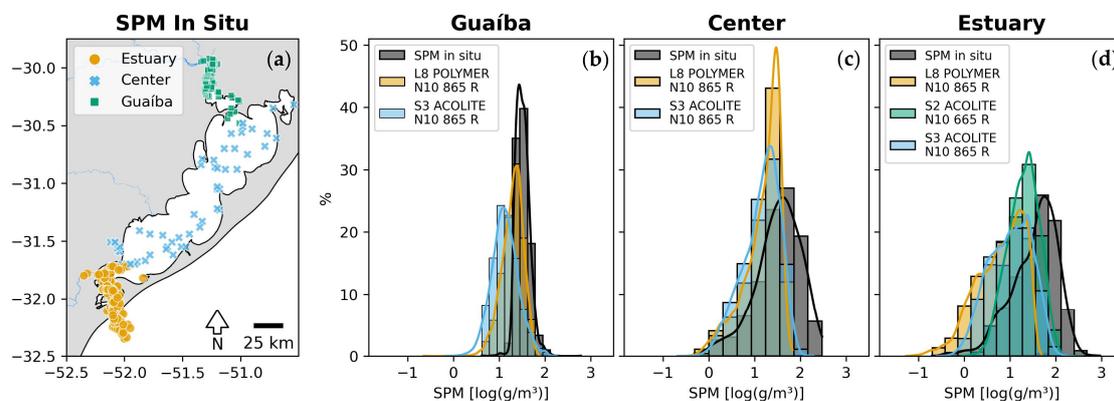


Figure 12. (a) Spatial distribution of in situ SPM data, along with the frequency distributions for SPM concentrations measured in situ and satellite-derived using the best combinations for each satellite (L8, S2, and S3) and recalibrated coefficients. The distributions are given for all available data points shown in (a) (including those that are not matchups), divided into three parts of Patos Lagoon: (b) Guaíba, (c) center, and (d) estuary.

Although multiple sensors were used (L8/OLI, S2/MSI, and S3/OLCI), an integration and intercomparison exercise was not one of our goals. Several approaches exist for data merging to reduce the systematic bias between sensors [73], which is fundamental for building climate records [74]. A simple and effective method is to match the cumulative distribution function (CDF) of satellite and in situ data, as used for satellite soil moisture estimates [75]. This is another possible future step for Patos Lagoon, especially considering the potential impact of climate change on coastal environments [76].

5. Conclusions

In this work, different combinations of atmospheric corrections and bio-optical algorithms for turbidity and SPM in Patos Lagoon were evaluated. The main conclusions are as follows:

- Based on the newly proposed GoF metric, the best algorithm performance was generally linked to POLYMER atmospheric correction, single-band algorithms (N09 and N10), and the NIR band (865 nm), with percentage errors (MAPEs) between 27% and 42% for turbidity and between 68% and 81% for SPM;

- Regional recalibration of the empirical coefficients for N09 and N10 led to a reduction in bias. We recommend the use of recalibrated coefficients for estimating the SPM concentration in Patos Lagoon via remote sensing. For turbidity, the original coefficients yielded a better performance for S2 and S3;
- The method used for recalibrating the coefficients (GeoCalVal) and the metric used to rank the performances (GoF) can be directly applied to other regions and optical remote-sensing products;

Future studies should focus on using field radiometric data, allowing the direct evaluation of atmospheric corrections and a better understanding of the optical variability of Patos Lagoon. The use of radiative transfer models is also a suitable alternative for filling these gaps, and merging data from multisensor climate records may provide important information on the impact of climate change in the region.

Supplementary Materials: The following Supplementary Material is available online from <https://github.com/rafael-simao/GoF>: a Jupyter Notebook with code in Python to estimate the goodness of fit (GoF) metric using some example data.

Author Contributions: Conceptualization, R.S., J.T., M.S.S. and E.F.; Data curation, R.S. and J.T.; Formal analysis, R.S.; Funding acquisition, E.F.; Investigation, R.S. and J.T.; Methodology, R.S., J.T., M.S.S. and E.F.; Project administration, J.T., M.S.S. and E.F.; Resources, E.F.; Software, R.S., J.T. and M.S.S.; Supervision, J.T., M.S.S. and E.F.; Validation, R.S., J.T., M.S.S. and E.F.; Visualization, R.S., J.T., M.S.S. and E.F.; Writing—original draft, R.S., J.T., M.S.S. and E.F.; Writing—review and editing, R.S., J.T., M.S.S. and E.F. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: The authors are grateful to the LOAD Project—Long-Term Analysis of Suspended Particulate Matter Concentrations Affecting Port Areas in Developing Countries (ONR grant N62909-19-1-2145); the SUNSET Project—South Brazilian Shelf Sediment Transport: Sources and Consequences (CAPES/COFECUB, Process 88887.192855/2018-00); and the Dutch Research Council (NWO) under the SPARKLES project (NWA.1507.21.001, Grant number 16422) for sponsoring this research. Elisa Helena Fernandes is a CNPq research fellow (PQ2 No 304684/2022-8). Rafael A. Simão was supported by a CNPq Master’s scholarship, process No. 131424/2022-0. We thank the resources provided by CAPES to support the Graduate Program in Oceanology at FURG.

Data Availability Statement: The original contributions presented in the study are included in the article and supplementary material, further inquiries can be directed to the corresponding author.

Acknowledgments: The authors are grateful to SiMCosta for readily providing turbidity data for the Patos Lagoon Estuary, to USGS/NASA for the Landsat-8 imagery, to ESA for the Sentinel-2 and Sentinel-3 imagery, to RBINS for the ACOLITE atmospheric correction, and to HYGEOs for the POLYMER atmospheric correction. We also thank the Laboratório de Oceanografia Costeira e Estuarina (LOCOSTE) of the Universidade Federal do Rio Grande (FURG) for supporting this research.

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

Appendix A. Additional Plots and Tables

Table A1. Recalibrated A coefficients for turbidity (N09 algorithm) and SPM (N10 algorithm) for each combination of satellites (L8, S2, and S3), atmospheric corrections (ACOLITE and POLYMER), and bands (665 and 865 nm).

AC Band	L8				S2				S3			
	ACOLITE		POLYMER		ACOLITE		POLYMER		ACOLITE		POLYMER	
	665	865	665	865	665	865	665	865	665	865	665	865
Turbidity	283.43	1616.89	700.11	6435.35	247.24	1418.96	440.81	4636.58	271.42	1751.17	447.48	3826.15
SPM	136.11	1229.06	219.57	2272.39	292.43	1724.03	551.38	5213.88	236.63	1033.23	298.97	2062.85

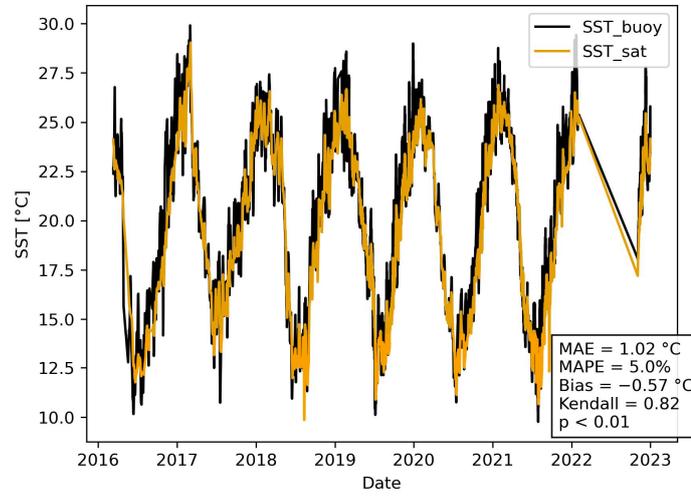


Figure A1. Time series of the sea surface temperature (SST) of Patos Lagoon based on in situ measurements (SiMCosta buoys) and reanalysis data (SST CCI L4 product).

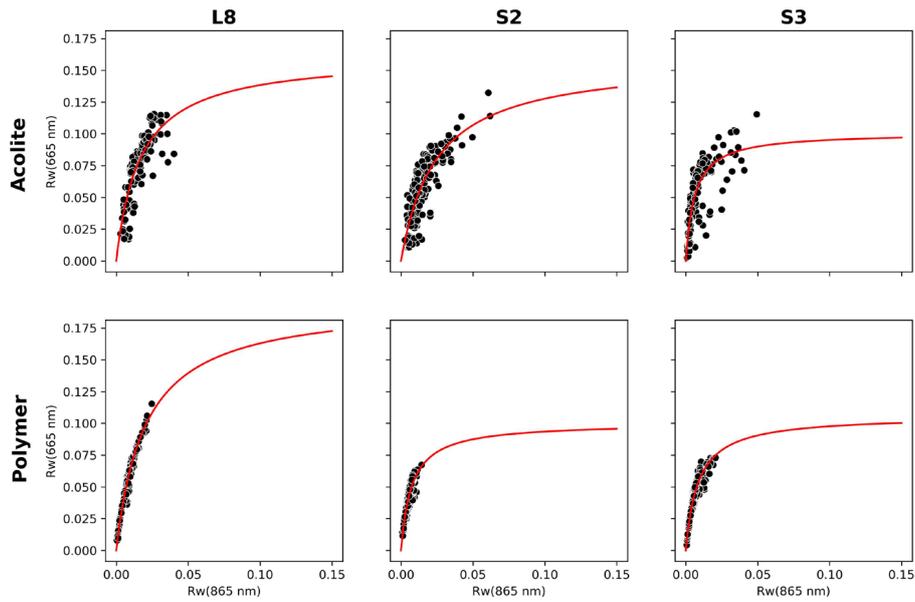


Figure A2. Optical saturation based on the NIR (x -axis) and red (y -axis) reflectance. The red line denotes the fitted regression between these two bands (as in [32]).

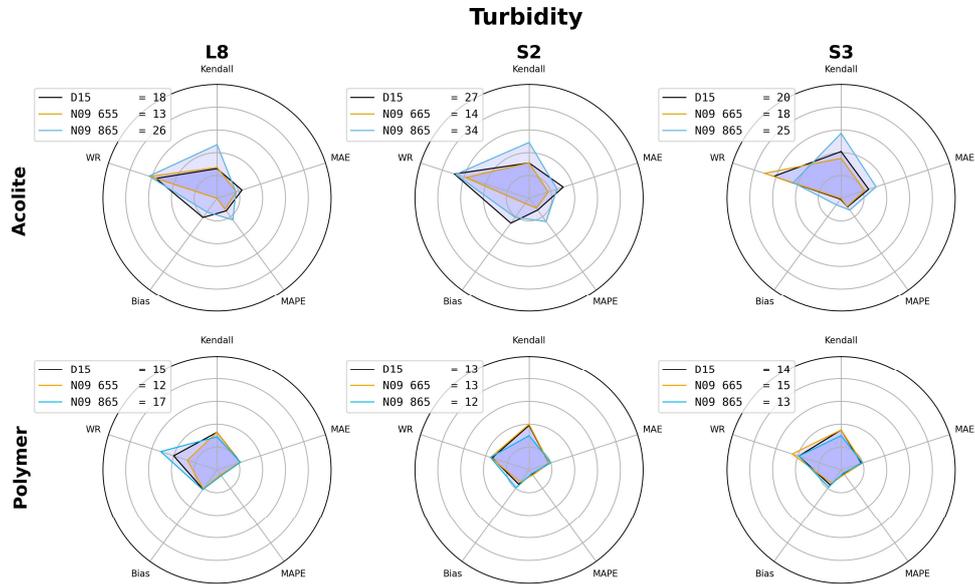


Figure A3. Radar plots of the statistical parameters for the turbidity estimates. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.

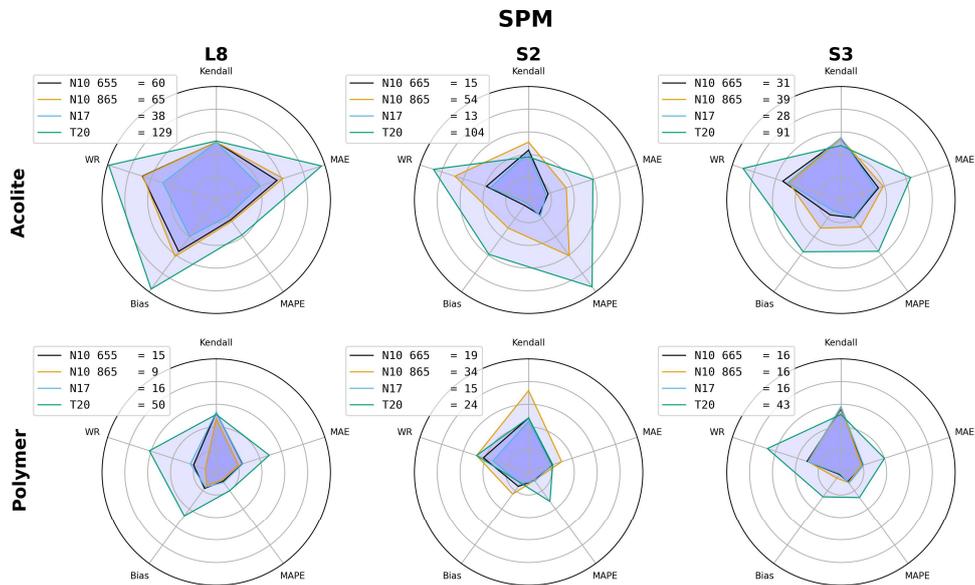


Figure A4. Radar plots of the statistical parameters for the SPM estimates. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.

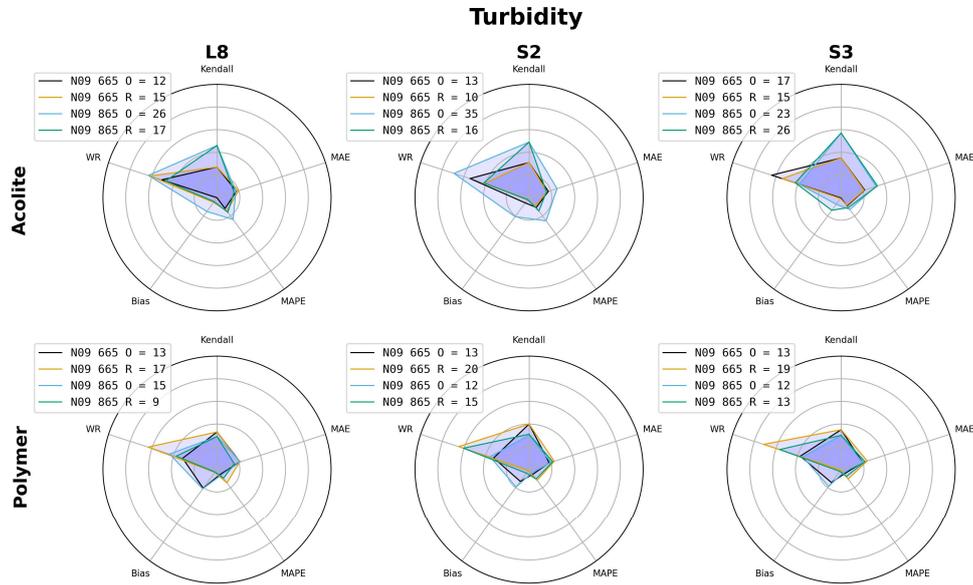


Figure A5. Radar plots of the statistical parameters for the turbidity estimates using the original (O) and recalibrated (R) coefficients. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.

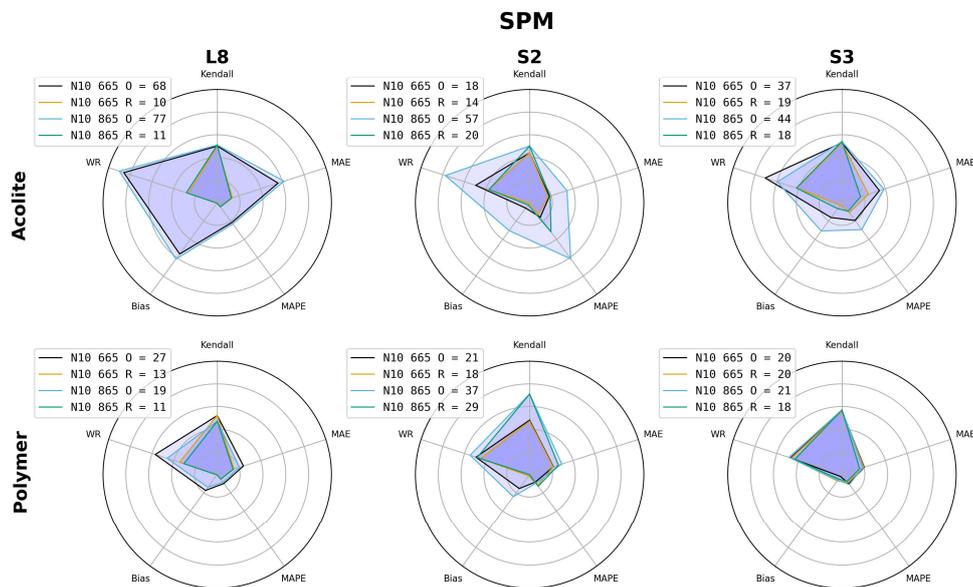


Figure A6. Radar plots of the statistical parameters for the SPM estimates generated using the original (O) and recalibrated (R) coefficients. The number after each algorithm and band denotes the area of the associated polygon. The best performance (smaller area) occurs closer to the center.

References

1. Kjerfve, B. Chapter 1 Coastal Lagoons. In *Coastal Lagoon Processes*; Elsevier Oceanography Series; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 1994; pp. 1–8, ISBN 978-0-444-88258-5.
2. Novoa, S.; Doxaran, D.; Ody, A.; Vanhellemont, Q.; Lafon, V.; Lubac, B.; Gernez, P. Atmospheric Corrections and Multi-Conditional Algorithm for Multi-Sensor Remote Sensing of Suspended Particulate Matter in Low-to-High Turbidity Levels Coastal Waters. *Remote Sens.* **2017**, *9*, 61. [\[CrossRef\]](#)
3. Tavora, J.; Fernandes, E.H.L.; Thomas, A.C.; Weatherbee, R.; Schettini, C.A.F. The Influence of River Discharge and Wind on Patos Lagoon, Brazil, Suspended Particulate Matter. *Int. J. Remote Sens.* **2019**, *40*, 4506–4525. [\[CrossRef\]](#)
4. Vantrepotte, V.; Gensac, E.; Loisel, H.; Gardel, A.; Dessailly, D.; Mériaux, X. Satellite Assessment of the Coupling between in Water Suspended Particulate Matter and Mud Banks Dynamics over the French Guiana Coastal Domain. *J. S. Am. Earth Sci.* **2013**, *44*, 25–34. [\[CrossRef\]](#)
5. Bordin, L.H.; Machado, E.D.C.; Mendes, C.R.B.; Fernandes, E.H.L.; Camargo, M.G.; Kerr, R.; Schettini, C.A. Daily Variability of Pelagic Metabolism in a Subtropical Lagoonal Estuary. *J. Mar. Syst.* **2023**, *240*, 103861. [\[CrossRef\]](#)
6. Kitchener, B.G.; Wainwright, J.; Parsons, A.J. A Review of the Principles of Turbidity Measurement. *Prog. Phys. Geogr. Earth Environ.* **2017**, *41*, 620–642. [\[CrossRef\]](#)
7. Hongve, D.; Åkesson, G. Comparison of Nephelometric Turbidity Measurements Using Wavelengths 400–600 and 860 Nm. *Water Res.* **1998**, *32*, 3143–3145. [\[CrossRef\]](#)
8. Neukermans, G.; Ruddick, K.; Loisel, H.; Roose, P. Optimization and Quality Control of Suspended Particulate Matter Concentration Measurement Using Turbidity Measurements: Optimizing [SPM] Measurement. *Limnol. Oceanogr. Methods* **2012**, *10*, 1011–1023. [\[CrossRef\]](#)
9. Nechad, B.; Ruddick, K.G.; Neukermans, G. *Calibration and Validation of a Generic Multisensor Algorithm for Mapping of Turbidity in Coastal Waters*; Bostater, C.R., Jr., Mertikas, S.P., Neyt, X., Velez-Reyes, M., Eds.; SPIE: Berlin, Germany, 2009; p. 74730H.
10. Tavora, J.; Jiang, B.; Kiffney, T.; Bourdin, G.; Gray, P.C.; Carvalho, L.S.; Hesketh, G.; Schild, K.M.; Souza, L.F.; Brady, D.C.; et al. Recipes for the Derivation of Water Quality Parameters Using the High-Spatial-Resolution Data from Sensors on Board Sentinel-2A, Sentinel-2B, Landsat-5, Landsat-7, Landsat-8, and Landsat-9 Satellites. *J. Remote Sens.* **2023**, *3*, 0049. [\[CrossRef\]](#)
11. Pahlevan, N.; Mangin, A.; Balasubramanian, S.V.; Smith, B.; Alikas, K.; Arai, K.; Barbosa, C.; Bélanger, S.; Binding, C.; Bresciani, M.; et al. ACIX-Aqua: A Global Assessment of Atmospheric Correction Methods for Landsat-8 and Sentinel-2 over Lakes, Rivers, and Coastal Waters. *Remote Sens. Environ.* **2021**, *258*, 112366. [\[CrossRef\]](#)
12. Luo, Y.; Doxaran, D.; Vanhellemont, Q. Retrieval and Validation of Water Turbidity at Metre-Scale Using Pléiades Satellite Data: A Case Study in the Gironde Estuary. *Remote Sens.* **2020**, *12*, 946. [\[CrossRef\]](#)
13. Gordon, H.R.; Wang, M. Retrieval of Water-Leaving Radiance and Aerosol Optical Thickness over the Oceans with SeaWiFS: A Preliminary Algorithm. *Appl. Opt.* **1994**, *33*, 443–452. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
14. Vanhellemont, Q.; Ruddick, K. Turbid Wakes Associated with Offshore Wind Turbines Observed with Landsat 8. *Remote Sens. Environ.* **2014**, *145*, 105–115. [\[CrossRef\]](#)
15. Bailey, S.W.; Franz, B.A.; Werdell, P.J. Estimation of Near-Infrared Water-Leaving Reflectance for Satellite Ocean Color Data Processing. *Opt. Express* **2010**, *18*, 7521–7527. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
16. Steinmetz, F.; Deschamps, P.-Y.; Ramon, D. Atmospheric Correction in Presence of Sun Glint: Application to MERIS. *Opt. Express* **2011**, *19*, 9783–9800. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
17. Vanhellemont, Q.; Ruddick, K. Atmospheric Correction of Metre-Scale Optical Satellite Data for Inland and Coastal Water Applications. *Remote Sens. Environ.* **2018**, *216*, 586–597. [\[CrossRef\]](#)
18. Salama, M.S.; Radwan, M.; Van Der Velde, R. A Hydro-Optical Model for Deriving Water Quality Variables from Satellite Images (HydroSat): A Case Study of the Nile River Demonstrating the Future Sentinel-2 Capabilities. *Phys. Chem. Earth Parts A/B/C* **2012**, *50–52*, 224–232. [\[CrossRef\]](#)
19. Brockmann, C.; Doerffer, R.; Peters, M.; Stelzer, K.; Embacher, S.; Ruescas, A. 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. In Proceedings of the Conference Held Living Planet Symposium, Prague, Czech Republic, 9–13 May 2016.
20. Hieronymi, M.; Bi, S.; Müller, D.; Schütt, E.M.; Behr, D.; Brockmann, C.; Lebreton, C.; Steinmetz, F.; Stelzer, K.; Vanhellemont, Q. Corrigendum: Ocean Color Atmospheric Correction Methods in View of Usability for Different Optical Water Types. *Front. Mar. Sci.* **2023**, *10*, 1307517. [\[CrossRef\]](#)
21. Vermote, E.F.; Tanre, D.; Deuze, J.L.; Herman, M.; Morcette, J.-J. Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum, 6S: An Overview. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* **1997**, *35*, 675–686. [\[CrossRef\]](#)
22. Vanhellemont, Q.; Ruddick, K. Atmospheric Correction of Sentinel-3/OLCI Data for Mapping of Suspended Particulate Matter and Chlorophyll-a Concentration in Belgian Turbid Coastal Waters. *Remote Sens. Environ.* **2021**, *256*, 112284. [\[CrossRef\]](#)
23. Steinmetz, F.; Ramon, D. *Sentinel-2 MSI and Sentinel-3 OLCI Consistent Ocean Colour Products Using POLYMER*; Frouin, R.J., Murakami, H., Eds.; SPIE: Honolulu, HI, USA, 2018; p. 10.
24. Mabit, R.; Araújo, C.A.S.; Singh, R.K.; Bélanger, S. Empirical Remote Sensing Algorithms to Retrieve SPM and CDOM in Québec Coastal Waters. *Front. Remote Sens.* **2022**, *3*, 834908. [\[CrossRef\]](#)

25. Theenathayalan, V.; Sathyendranath, S.; Kulk, G.; Menon, N.; George, G.; Abdulaziz, A.; Selmes, N.; Brewin, R.; Rajendran, A.; Xavier, S.; et al. Regional Satellite Algorithms to Estimate Chlorophyll-a and Total Suspended Matter Concentrations in Vembanad Lake. *Remote Sens.* **2022**, *14*, 6404. [[CrossRef](#)]
26. Renosh, P.R.; Doxaran, D.; Keukelaere, L.D.; Gossn, J.I. Evaluation of Atmospheric Correction Algorithms for Sentinel-2-MSI and Sentinel-3-OLCI in Highly Turbid Estuarine Waters. *Remote Sens.* **2020**, *12*, 1285. [[CrossRef](#)]
27. Nechad, B.; Ruddick, K.; Park, Y. Calibration and Validation of a Generic Multisensor Algorithm for Mapping of Total Suspended Matter in Turbid Waters. *Remote Sens. Environ.* **2010**, *114*, 854–866. [[CrossRef](#)]
28. Yu, X.; Lee, Z.; Shen, F.; Wang, M.; Wei, J.; Jiang, L.; Shang, Z. An Empirical Algorithm to Seamlessly Retrieve the Concentration of Suspended Particulate Matter from Water Color across Ocean to Turbid River Mouths. *Remote Sens. Environ.* **2019**, *235*, 111491. [[CrossRef](#)]
29. Távora, J.; Boss, E.; Doxaran, D.; Hill, P. An Algorithm to Estimate Suspended Particulate Matter Concentrations and Associated Uncertainties from Remote Sensing Reflectance in Coastal Environments. *Remote Sens.* **2020**, *12*, 2172. [[CrossRef](#)]
30. Salama, M.S.; Verhoef, W. Two-Stream Remote Sensing Model for Water Quality Mapping: 2SeaColor. *Remote Sens. Environ.* **2015**, *157*, 111–122. [[CrossRef](#)]
31. Babin, M.; Morel, A.; Fournier-Sicre, V.; Fell, F.; Stramski, D. Light Scattering Properties of Marine Particles in Coastal and Open Ocean Waters Asrelated to the Particle Mass Concentration. *Limnol. Oceanogr.* **2003**, *48*, 843–859. [[CrossRef](#)]
32. Luo, Y.; Doxaran, D.; Ruddick, K.; Shen, F.; Gentili, B.; Yan, L.; Huang, H. Saturation of Water Reflectance in Extremely Turbid Media Based on Field Measurements, Satellite Data and Bio-Optical Modelling. *Opt. Express* **2018**, *26*, 10435–10451. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
33. Dogliotti, A.I.; Ruddick, K.G.; Nechad, B.; Doxaran, D.; Knaeps, E. A Single Algorithm to Retrieve Turbidity from Remotely-Sensed Data in All Coastal and Estuarine Waters. *Remote Sens. Environ.* **2015**, *156*, 157–168. [[CrossRef](#)]
34. Tavora, J.; Gonçalves, G.A.; Fernandes, E.H.; Salama, M.S.; Van Der Wal, D. Detecting Turbid Plumes from Satellite Remote Sensing: State-of-Art Thresholds and the Novel PLUMES Algorithm. *Front. Mar. Sci.* **2023**, *10*, 1215327. [[CrossRef](#)]
35. Vanhellemont, Q. Adaptation of the Dark Spectrum Fitting Atmospheric Correction for Aquatic Applications of the Landsat and Sentinel-2 Archives. *Remote Sens. Environ.* **2019**, *225*, 175–192. [[CrossRef](#)]
36. Távora, J.; Fernandes, E.; Bitencourt, L.; Orozco, P. El-Niño Southern Oscillation (ENSO) Effects on the Variability of Patos Lagoon Suspended Particulate Matter. *Reg. Stud. Mar. Sci.* **2020**, *40*, 101495. [[CrossRef](#)]
37. Wang, M.; Shi, W. The NIR-SWIR Combined Atmospheric Correction Approach for MODIS Ocean Color Data Processing. *Opt. Express* **2007**, *15*, 15722. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
38. Han, B.; Loisel, H.; Vantrepotte, V.; Mériaux, X.; Bryère, P.; Ouillon, S.; Dessailly, D.; Xing, Q.; Zhu, J. Development of a Semi-Analytical Algorithm for the Retrieval of Suspended Particulate Matter from Remote Sensing over Clear to Very Turbid Waters. *Remote Sens.* **2016**, *8*, 211. [[CrossRef](#)]
39. Kjerfve, B. Comparative oceanography of coastal lagoons. In *Estuarine Variability*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 1986; pp. 63–81, ISBN 978-0-12-761890-6.
40. Fernandes, E.; Mariño-Tapia, I.; Dyer, K.; Möller, O. The Attenuation of Tidal and Subtidal Oscillations in the Patos Lagoon Estuary. *Ocean. Dyn.* **2004**, *54*, 348–359. [[CrossRef](#)]
41. Moller, O.; Castaing, P.; Salomon, J.-C.; Lazure, P. The Influence of Local and Non-Local Forcing Effects on the Subtidal Circulation of Patos Lagoon. *Estuaries* **2001**, *24*, 297–311. [[CrossRef](#)]
42. Bortolin, E.C.; Távora, J.; Fernandes, E. Long-Term Variability on Suspended Particulate Matter Loads from the Tributaries of the World's Largest Choked Lagoon. *Front. Mar. Sci.* **2022**, *9*, 836739. [[CrossRef](#)]
43. Andrade Neto, J.S.D.; Rigon, L.T.; Toldo, E.E., Jr.; Schettini, C.A.F. Descarga Sólida Em Suspensão Do Sistema Fluvial Do Guaíba, RS, e Sua Variabilidade Temporal. *Pesq. Geoc* **2012**, *39*, 161. [[CrossRef](#)]
44. Möller, O.; Távora, J.; Möller, B.; Fernandes, E. Instituto de Oceanografia, Universidade Federal do Rio Grande (FURG), Rio Grande, Rio Grande do Sul, Brazil. 2024; *in preparation*.
45. Távora, J.; Fernandes, E.; Möller, O.O. Patos Lagoon, Brazil, Suspended Particulate Matter (SPM) Data Compendium. *Geosci. Data J.* **2021**, *9*, 235–255. [[CrossRef](#)]
46. Valente, A.; Sathyendranath, S.; Brotas, V.; Groom, S.; Grant, M.; Taberner, M.; Antoine, D.; Arnone, R.; Balch, W.M.; Barker, K.; et al. A Compilation of Global Bio-Optical in Situ Data for Ocean-Colour Satellite Applications. *Earth Syst. Sci. Data* **2016**, *8*, 235–252. [[CrossRef](#)]
47. Park, Y.-J.; Ruddick, K. Model of Remote-Sensing Reflectance Including Bidirectional Effects for Case 1 and Case 2 Waters. *Appl. Opt.* **2005**, *44*, 1236. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
48. Dierssen, H.M.; Vandermeulen, R.A.; Barnes, B.B.; Castagna, A.; Knaeps, E.; Vanhellemont, Q. QWIP: A Quantitative Metric for Quality Control of Aquatic Reflectance Spectral Shape Using the Apparent Visible Wavelength. *Front. Remote Sens.* **2022**, *3*, 869611. [[CrossRef](#)]
49. Vandermeulen, R.A.; Mannino, A.; Craig, S.E.; Werdell, P.J. 150 Shades of Green: Using the Full Spectrum of Remote Sensing Reflectance to Elucidate Color Shifts in the Ocean. *Remote Sens. Environ.* **2020**, *247*, 111900. [[CrossRef](#)]
50. IOCCG. *Uncertainties in Ocean Colour Remote Sensing*; IOCCG Report Series; International Ocean Colour Coordinating Group: Dartmouth, NS, Canada, 2019.

51. Merchant, C.J.; Embury, O.; Bulgin, C.E.; Block, T.; Corlett, G.K.; Fiedler, E.; Good, S.A.; Mittaz, J.; Rayner, N.A.; Berry, D.; et al. Satellite-Based Time-Series of Sea-Surface Temperature since 1981 for Climate Applications. *Sci. Data* **2019**, *6*, 223. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
52. Salama, M.S.; Van Der Velde, R.; Van Der Woerd, H.J.; Kromkamp, J.C.; Philippart, C.J.M.; Joseph, A.T.; O'Neill, P.E.; Lang, R.H.; Gish, T.; Werdell, P.J.; et al. Technical Note: Calibration and Validation of Geophysical Observation Models. *Biogeosciences* **2012**, *9*, 2195–2201. [[CrossRef](#)]
53. Seegers, B.N.; Stumpf, R.P.; Schaeffer, B.A.; Loftin, K.A.; Werdell, P.J. Performance Metrics for the Assessment of Satellite Data Products: An Ocean Color Case Study. *Opt. Express* **2018**, *26*, 7404. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
54. Broomell, S.B.; Budescu, D.V.; Por, H.-H. Pair-Wise Comparisons of Multiple Models. *Judgm. Decis. Mak.* **2011**, *6*, 821–831. [[CrossRef](#)]
55. Tran, M.D.; Vantrepotte, V.; Loisel, H.; Oliveira, E.N.; Tran, K.T.; Jorge, D.; Mériaux, X.; Paranhos, R. Band Ratios Combination for Estimating Chlorophyll-a from Sentinel-2 and Sentinel-3 in Coastal Waters. *Remote Sens.* **2023**, *15*, 1653. [[CrossRef](#)]
56. Ody, A.; Doxaran, D.; Verney, R.; Bourrin, F.; Morin, G.P.; Pairaud, I.; Gangloff, A. Ocean Color Remote Sensing of Suspended Sediments along a Continuum from Rivers to River Plumes: Concentration, Transport, Fluxes and Dynamics. *Remote Sens.* **2022**, *14*, 2026. [[CrossRef](#)]
57. Costi, J.; Moraes, B.C.; Marques, W.C. A Regional Algorithm for Investigating the Patos Lagoon Coastal Plume Using Aqua/MODIS and Oceanographic Data. *Mar. Syst. Ocean Technol.* **2017**, *12*, 166–177. [[CrossRef](#)]
58. Pagot, M.; Rodríguez, A.; Hillman, G.; Corral, M.; Oroná, C.; Niencheski, L.F. Remote Sensing Assessment of Suspended Matter and Dynamics in Patos Lagoon. *J. Coast. Res.* **2007**, *10047*, 116–129. [[CrossRef](#)]
59. Barbosa, F.G.; Lanari, M. Bibliometric Analysis of Peer-Reviewed Literature on the Patos Lagoon, Southern Brazil. *An. Acad. Bras. Ciênc.* **2022**, *94*, e20210861. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
60. Tanre, D.; Herman, M.; Deschamps, P.Y. Influence of the Background Contribution upon Space Measurements of Ground Reflectance. *Appl. Opt.* **1981**, *20*, 3676. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
61. Bulgarelli, B.; Zibordi, G. On the Detectability of Adjacency Effects in Ocean Color Remote Sensing of Mid-Latitude Coastal Environments by SeaWiFS, MODIS-A, MERIS, OLCI, OLI and MSI. *Remote Sens. Environ.* **2018**, *209*, 423–438. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
62. Paulino, R.S.; Martins, V.S.; Novo, E.M.L.M.; Barbosa, C.C.F.; De Carvalho, L.A.S.; Begliomini, F.N. Assessment of Adjacency Correction over Inland Waters Using Sentinel-2 MSI Images. *Remote Sens.* **2022**, *14*, 1829. [[CrossRef](#)]
63. Pahlevan, N.; Sarkar, S.; Franz, B.A. Uncertainties in Coastal Ocean Color Products: Impacts of Spatial Sampling. *Remote Sens. Environ.* **2016**, *181*, 14–26. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
64. Dorji, P.; Fearn, P. Impact of the Spatial Resolution of Satellite Remote Sensing Sensors in the Quantification of Total Suspended Sediment Concentration: A Case Study in Turbid Waters of Northern Western Australia. *PLoS ONE* **2017**, *12*, e0175042. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
65. Haraguchi, L.; Carstensen, J.; Abreu, P.C.; Odebrecht, C. Long-Term Changes of the Phytoplankton Community and Biomass in the Subtropical Shallow Patos Lagoon Estuary, Brazil. *Estuar. Coast. Shelf Sci.* **2015**, *162*, 76–87. [[CrossRef](#)]
66. Abreu, P.C.; Odebrecht, C.; González, A. Particulate and Dissolved Phytoplankton Production of the Patos Lagoon Estuary, Southern Brazil: Comparison of Methods and Influencing Factors. *J. Plankton Res.* **1994**, *16*, 737–753. [[CrossRef](#)]
67. Reynolds, R.A.; Stramski, D.; Neukermans, G. Optical Backscattering by Particles in Arctic Seawater and Relationships to Particle Mass Concentration, Size Distribution, and Bulk Composition. *Limnol. Oceanogr.* **2016**, *61*, 1869–1890. [[CrossRef](#)]
68. Willmott, C.; Robeson, S.; Matsuura, K. Climate and Other Models May Be More Accurate Than Reported. *EOS* **2017**, *98*, 13–14. [[CrossRef](#)]
69. Cordeiro, C.A.M.M.; Aued, A.W.; Barros, F.; Bastos, A.C.; Bender, M.; Mendes, T.C.; Creed, J.C.; Cruz, I.C.S.; Dias, M.S.; Fernandes, L.D.A.; et al. Long-Term Monitoring Projects of Brazilian Marine and Coastal Ecosystems. *PeerJ* **2022**, *10*, e14313. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
70. Etcheber, H.; Schmidt, S.; Sottolichio, A.; Maneux, E.; Chabaux, G.; Escalier, J.-M.; Wennekes, H.; Derriennic, H.; Schmeltz, M.; Quémener, L.; et al. Monitoring Water Quality in Estuarine Environments: Lessons from the MAGEST Monitoring Program in the Gironde Fluvial-Estuarine System. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **2011**, *15*, 831–840. [[CrossRef](#)]
71. Zibordi, G.; Mélin, F.; Berthon, J.-F.; Holben, B.; Slutsker, I.; Giles, D.; D'Alimonte, D.; Vandemark, D.; Feng, H.; Schuster, G.; et al. AERONET-OC: A Network for the Validation of Ocean Color Primary Products. *J. Atmos. Ocean. Technol.* **2009**, *26*, 1634–1651. [[CrossRef](#)]
72. Lehmann, M.K.; Gurlin, D.; Pahlevan, N.; Alikas, K.; Conroy, T.; Anstee, J.; Balasubramanian, S.V.; Barbosa, C.C.F.; Binding, C.; Bracher, A.; et al. GLORIA—A Globally Representative Hyperspectral in Situ Dataset for Optical Sensing of Water Quality. *Sci. Data* **2023**, *10*, 100. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
73. IOCCG. *Ocean-Colour Data Merging*; IOCCG Report Series; International Ocean Colour Coordinating Group: Dartmouth, NS, Canada, 2007.
74. Sathyendranath, S.; Brewin, R.; Brockmann, C.; Brotas, V.; Calton, B.; Chuprin, A.; Cipollini, P.; Couto, A.; Dingle, J.; Doerffer, R.; et al. An Ocean-Colour Time Series for Use in Climate Studies: The Experience of the Ocean-Colour Climate Change Initiative (OC-CCI). *Sensors* **2019**, *19*, 4285. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]

-
75. Brocca, L.; Hasenauer, S.; Lacava, T.; Melone, F.; Moramarco, T.; Wagner, W.; Dorigo, W.; Matgen, P.; Martínez-Fernández, J.; Llorens, P.; et al. Soil Moisture Estimation through ASCAT and AMSR-E Sensors: An Intercomparison and Validation Study across Europe. *Remote Sens. Environ.* **2011**, *115*, 3390–3408. [[CrossRef](#)]
 76. Cloern, J.E.; Abreu, P.C.; Carstensen, J.; Chauvaud, L.; Elmgren, R.; Grall, J.; Greening, H.; Johansson, J.O.R.; Kahru, M.; Sherwood, E.T.; et al. Human Activities and Climate Variability Drive Fast-paced Change across the World's Estuarine–Coastal Ecosystems. *Glob. Chang. Biol.* **2016**, *22*, 513–529. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]

Disclaimer/Publisher's Note: The statements, opinions and data contained in all publications are solely those of the individual author(s) and contributor(s) and not of MDPI and/or the editor(s). MDPI and/or the editor(s) disclaim responsibility for any injury to people or property resulting from any ideas, methods, instructions or products referred to in the content.

Capítulo VI: Síntese da Discussão

Estudos da turbidez por sensoriamento remoto na Lagoa dos Patos envolvem a delimitação de plumas (como nos algoritmos de Costi *et al.* [2017] e Távora *et al.* [2023a]) e a avaliação da qualidade da água [Távora *et al.* 2023b]. Comparativamente, os estudos de [Távora *et al.* 2023ab] indicam que a melhor combinação para a área de estudo envolve correção atmosférica do POLYMER, algoritmo de N09 (com necessidade de recalibração dos coeficientes) e banda do NIR, em concordância com o presente trabalho.

O sensoriamento remoto do MPS na área de estudo envolve um número maior de aplicações, que investigam a variabilidade espaço-temporal deste parâmetro na lagoa e em seus tributários [Pagot *et al.* 2007; Távora *et al.* 2019; Távora *et al.* 2020b; Bortolin *et al.* 2022]. O trabalho de [Bortolin *et al.* 2022] traz uma avaliação de estimativas de MPS utilizando correção atmosférica do ACOLITE, algoritmo T20 e satélites Landsat 5, 7 e 8, com desempenho superior ao encontrado no presente trabalho para o L8. Já o trabalho de Távora *et al.* [2020b] comparou o desempenho de três algoritmos (N10, N17 e H16 [Han *et al.* 2016]), com correção atmosférica de Wang & Shi [2007] e satélite/sensor Aqua/*Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS). Novamente, foi observado um desempenho superior ao do presente trabalho em relação ao S3, que possui resolução espacial semelhante ao MODIS.

As diferenças nos desempenhos em relação aos trabalhos anteriores podem ser explicadas com base: nas fontes de dados (de MPS ou de temperatura, para o algoritmo T20), na seleção dos *matchups* (máxima diferença espacial e temporal permitida), nos satélites escolhidos (alguns não utilizados aqui), nas correções atmosféricas (incluindo diferentes versões do ACOLITE) e nos algoritmos de MPS (como nos parâmetros de entrada para o T20).

O viés observado nas estimativas de turbidez e MPS levou à necessidade de recalibrar regionalmente os algoritmos N09 e N10, o que pode ser atribuído a erros nas correções atmosféricas e às POI da área de estudo. Efeitos de adjacência podem contribuir para esses erros e ocorrem na proximidade com o continente, fazendo com que a luz vinda de áreas próximas seja espalhada para o campo de visada do sensor [Tanre *et al.* 1981; Bulgarelli & Zibordi 2018; Paulino *et al.* 2022]. Isso pode ser relevante, especialmente considerando o canal que conecta a Lagoa dos Patos ao oceano e as partes mais internas do Guaíba (Fig. 1), pontos que apresentaram os maiores erros nas estimativas de MPS. Os erros foram maiores para o satélite com menor resolução espacial (S3), o que pode estar associado à maior área e, conseqüentemente, maior variabilidade óptica de cada pixel [Pahlevan *et al.* 2016; Dorji & Fearn 2017; Luo *et al.* 2020]. Além disso, esses erros foram menores para a correção atmosférica do POLYMER, que tem a capacidade de corrigir os efeitos de adjacência [Steinmetz & Ramon 2018]. Por outro lado, o POLYMER subestimou a turbidez e a concentração de MPS, o que possivelmente reflete limitações do modelo bio-óptico utilizado por essa correção atmosférica [Vanhellemont & Ruddick 2021].

Ademais, as características ópticas da Lagoa dos Patos podem ser distintas das encontradas nas regiões utilizadas para o desenvolvimento de N09 e N10. Tais características estão relacionadas, principalmente, aos coeficientes específicos de absorção (a_p^*) e retroespalhamento (b_{bp}^*), que variam com as características das partículas [Babin *et al.* 2003ab; Mabit *et al.* 2022]. Mudanças relacionadas ao fitoplâncton [Abreu *et al.* 1994; Haraguchi *et al.* 2015] e na absorção por CDOM [Mabit *et al.* 2022] também ajudam a explicar os erros encontrados no presente trabalho.

A saturação óptica está relacionada às características ópticas das partículas e demais constituintes opticamente ativas, além do comprimento de onda [Luo *et al.* 2018], fazendo com que a banda ideal seja diferente para cada caso [Ody *et al.* 2022]. Para o presente trabalho, os melhores desempenhos foram obtidos por algoritmos de

banda única com a banda do NIR, indicando que mecanismos de troca não levaram a resultados superiores e que valores elevados de turbidez e concentração de MPS apresentaram grande influência nos erros.

Sobre a metodologia utilizada na recalibração, destaca-se a importância do método GeoCalVal [Salama *et al.* 2012b], que possibilitou o ajuste dos dados de maneira mais objetiva que técnicas tradicionais (com um único par de calibração e validação). A nova métrica proposta para a classificação dos desempenhos (GoF) também se mostrou relevante, combinando de maneira robusta diferentes parâmetros estatísticos (correlação, acurácia, viés e comparação de resíduos). Apesar de a recalibração não ter melhorado o desempenho em todos os casos, as melhores estimativas, em geral, foram obtidas com os coeficientes recalibrados (principalmente para o MPS).

Se disponíveis, a utilização de dados radiométricos poderia beneficiar o trabalho, com uma avaliação direta das correções atmosféricas e uma melhor compreensão da variabilidade óptica da região. Além disso, recalibrar os coeficientes para porções da Lagoa dos Patos (como para o Guaíba e para o estuário separadamente) poderia levar a um melhor desempenho, mas o número de *matchups* era insuficiente para essa abordagem local. Outros estudos apresentam passos a serem seguidos, como a utilização de modelos de transferência radiativa [Theenathayalan *et al.* 2022], estações para aquisição automática de dados radiométricos [Zibordi *et al.* 2009], aplicação de conjuntos de dados globais [Lehmann *et al.* 2023] e construção de registros climáticos multissensores [Sathyendranath *et al.* 2019]. Ainda assim, destacam-se os esforços para medições em campo na área de estudo, como pelo SiMCosta e pela Projeto Pesquisa Ecológica de Longa Duração no Estuário da Lagoa dos Patos (PELD - ELPA) [Cordeiro *et al.* 2022].

Capítulo VII: Conclusões

O presente trabalho apresentou avaliações e recomendações para o sensoriamento remoto de turbidez e concentração de MPS na Lagoa dos Patos, considerando diferentes correções atmosféricas e algoritmos. Seguindo os objetivos específicos do trabalho, destaca-se que:

- I. Diferentes conclusões sobre os erros nas estimativas podem ser tiradas com base no parâmetro estatístico escolhido, o que dificulta uma análise comparativa. Assim, uma nova métrica foi proposta (GoF), que fornece uma abordagem mais objetiva dos vários parâmetros e pode ser diretamente aplicada a outras regiões e variáveis;
- II. Diante do elevado viés nas estimativas de turbidez e MPS, optou-se pela recalibração regional dos algoritmos N09 e N10. A recalibração reduziu o viés (Bias) das estimativas, mas não promoveu uma melhora na acurácia (MAE) em todos os casos. Ainda, assim, a maioria dos melhores desempenhos esteve associado a coeficientes recalibrados;
- III. Para a turbidez, as melhores combinações foram obtidas com correção atmosférica do POLYMER, algoritmo N09, banda do NIR e coeficientes

originais (exceto para L8). Já para o MPS, a melhor combinação foi dada por ACOLITE, algoritmo N10, banda do NIR e coeficientes recalibrados.

Para futuros trabalhos, ficam como recomendações: (i) utilização de dados radiométricos *in situ* para avaliação direta das correções atmosféricas e das POI da área de estudo; (ii) aplicação de métodos de transferência radiativa, que permitem uma melhor compreensão das POI e a criação de conjuntos de dados para a calibração de algoritmos regionais; (iii) integração de dados de diferentes sensores para estudos de mudanças climáticas e eventos extremos na região.

Capítulo VIII: Referências Bibliográficas

- Abreu PC, Odebrecht C, González A (1994) Particulate and dissolved phytoplankton production of the Patos Lagoon estuary, southern Brazil: comparison of methods and influencing factors. *J Plankton Res* 16:737–753. doi:10.1093/plankt/16.7.737
- Andrade Neto JSD, Rigon LT, Toldo Jr. EE, Schettini CAF (2012) Descarga sólida em suspensão do sistema fluvial do Guaíba, RS, e sua variabilidade temporal. *Pesq Geoc* 39:161. doi:10.22456/1807-9806.35910
- Aurin D, Mannino A, Lary DJ (2018) Remote Sensing of CDOM, CDOM Spectral Slope, and Dissolved Organic Carbon in the Global Ocean. *Applied Sciences* 8:2687. doi:10.3390/app8122687
- Ávila RA, Orozco PMS, Andrade MM, Möller OO (2021) Temporal Variability of Suspended-Solids Concentration in the Estuarine Channel of Patos Lagoon, Southern Brazil. *Water* 13:646. doi:10.3390/w13050646
- Babin M, Morel A, Fournier-Sicre V, Fell F, Stramski D (2003) Light scattering properties of marine particles in coastal and open ocean waters as related to the particle mass concentration. *Limnol. Oceanogr.* 48:843–859. doi:10.4319/lo.2003.48.2.0843
- Babin M, Stramski D, Ferrari GM, 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. *J. Geophys. Res.* 108:2001JC000882. doi:10.1029/2001JC000882
- Bailey SW, Franz BA, Werdell PJ (2010) Estimation of near-infrared water-leaving reflectance for satellite ocean color data processing. *Opt. Express* 18:7521–7527. doi:10.1364/OE.18.007521
- Barreneche JM, Guigou B, Gallego F, Barbieri A, Smith B, Fernández M, Fernández V, Pahlevan N (2023) Monitoring Uruguay's freshwaters from space: An assessment of different satellite image processing schemes for chlorophyll-a estimation. *Remote Sensing Applications: Society and Environment* 29:100891. doi:10.1016/j.rsase.2022.100891
- Bitencourt L, Fernandes E, Möller O, Ross L (2020) The contribution of ENSO cycles to the salinity spatio-temporal variability in a bar-built microtidal estuary. *Regional Studies in Marine Science* 40:101496. doi:10.1016/j.rsma.2020.101496
- Bodhaine BA, Wood NB, Dutton EG, Slusser JR (1999) On Rayleigh Optical Depth Calculations. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology* 16:1854–1861. doi:10.1175/1520-0426(1999)016<1854:ORODC>2.0.CO;2
- Bonelli AG, Vantrepotte V, Jorge DSF, Demaria J, Jamet C, Dessailly D, Mangin A, Fanton d'Andon O, Kwiatkowska E, Loisel H (2021) Colored dissolved organic matter absorption at global scale from ocean color radiometry observation: Spatio-temporal

variability and contribution to the absorption budget. *Remote Sensing of Environment* 265:112637. doi:10.1016/j.rse.2021.112637

Bordin LH, Machado EDC, Mendes CRB, Fernandes EHL, Camargo MG, Kerr R, Schettini CA (2023) Daily variability of pelagic metabolism in a subtropical lagoonal estuary. *Journal of Marine Systems* 240:103861. doi:10.1016/j.jmarsys.2023.103861

Bortolin EC, Távora J, Fernandes E (2022) Long-Term Variability on Suspended Particulate Matter Loads From the Tributaries of the World's Largest Choked Lagoon. *Front. Mar. Sci.* 9:836739. doi:10.3389/fmars.2022.836739

Bortolin EC, Weschenfelder J, Fernandes EH, Bitencourt LP, Möller OO, García-Rodríguez F, Toldo E (2020) Reviewing sedimentological and hydrodynamic data of large shallow coastal lagoons for defining mud depocenters as environmental monitoring sites. *Sedimentary Geology* 410:105782. doi:10.1016/j.sedgeo.2020.105782

Boudreau BP, Hill PS (2020) Rouse revisited: The bottom boundary condition for suspended sediment profiles. *Marine Geology* 419:106066. doi:10.1016/j.margeo.2019.106066

Bowers DG, Binding CE (2006) The optical properties of mineral suspended particles: A review and synthesis. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 67:219–230. doi:10.1016/j.ecss.2005.11.010

Bowers DG, Boudjelas S, Harker GEL (1998) The distribution of fine suspended sediments in the surface waters of the Irish Sea and its relation to tidal stirring. *International Journal of Remote Sensing* 19:2789–2805. doi:10.1080/014311698214514

Bréon FM (1993) An analytical model for the cloud-free atmosphere/ocean system reflectance. *Remote Sensing of Environment* 43:179–192. doi:10.1016/0034-4257(93)90007-K

Bréon FM, Henriot N (2006) Spaceborne observations of ocean glint reflectance and modeling of wave slope distributions. *J. Geophys. Res.* 111:2005JC003343. doi:10.1029/2005JC003343

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. In: *Living Planet Symposium*, pp 54

Broomell SB, Budescu DV, Por H-H (2011) Pair-wise comparisons of multiple models. *Judgm. decis. mak.* 6:821–831. doi:10.1017/S1930297500004241

Bulgarelli B, Zibordi G (2018) On the detectability of adjacency effects in ocean color remote sensing of mid-latitude coastal environments by SeaWiFS, MODIS-A, MERIS, OLCI, OLI and MSI. *Remote Sensing of Environment* 209:423–438. doi:10.1016/j.rse.2017.12.021

Burchard H, Schuttelaars HM, Ralston DK (2018) Sediment Trapping in Estuaries. *Annu. Rev. Mar. Sci.* 10:371–395. doi:10.1146/annurev-marine-010816-060535

- Bushnell M, Bailey K, Bosch J, Burger E, Dorton J, Easley R, Heitsenrether B, King J, Grissom K, Tamburri M, Thomas J, Waldmann C (2020) QARTOD - Prospects for Real-Time Quality Control Manuals, How to Create Them, and a Vision for Advanced Implementation. U.S. Department of Commerce, National Oceanic and Atmospheric Administration, National Ocean Service, Integrated Ocean Observing System, pp. doi:10.25607/OBP-927
- Cael BB, Bisson K, Boss E, Dutkiewicz S, Henson S (2023) Global climate-change trends detected in indicators of ocean ecology. *Nature* 619:551–554. doi:10.1038/s41586-023-06321-z
- Carrasco AR, Ferreira Ó, Roelvink D (2016) Coastal lagoons and rising sea level: A review. *Earth-Science Reviews* 154:356–368. doi:10.1016/j.earscirev.2015.11.007
- Cloern JE, Abreu PC, Carstensen J, Chauvaud L, Elmgren R, Grall J, Greening H, Johansson JOR, Kahru M, Sherwood ET, Xu J, Yin K (2016) Human activities and climate variability drive fast-paced change across the world’s estuarine–coastal ecosystems. *Global Change Biology* 22:513–529. doi:10.1111/gcb.13059
- Cordeiro CAMM, Aued AW, Barros F, Bastos AC, Bender M, Mendes TC, Creed JC, Cruz ICS, Dias MS, Fernandes LDA, Coutinho R, Gonçalves JEA, Floeter SR, Mello-Fonseca J, Freire AS, Gherardi DFM, Gomes LEO, Lacerda F, Martins RL, Longo GO, Mazzuco AC, Menezes R, Muelbert JH, Paranhos R, Quimbayo JP, Valentin JL, Ferreira CEL (2022) Long-term monitoring projects of Brazilian marine and coastal ecosystems. *PeerJ* 10:e14313. doi:10.7717/peerj.14313
- Costi J, Moraes BC, Marques WC (2017) A regional algorithm for investigating the Patos Lagoon coastal plume using Aqua/MODIS and oceanographic data. *Mar Syst Ocean Technol* 12:166–177. doi:10.1007/s40868-017-0032-4
- Cox C, Munk W (1954) Measurement of the Roughness of the Sea Surface from Photographs of the Sun’s Glitter. *J. Opt. Soc. Am.* 44:838. doi:10.1364/JOSA.44.000838
- Dierssen HM, Vandermeulen RA, Barnes BB, Castagna A, Knaeps E, Vanhellefont Q (2022) QWIP: A Quantitative Metric for Quality Control of Aquatic Reflectance Spectral Shape Using the Apparent Visible Wavelength. *Front. Remote Sens.* 3:869611. doi:10.3389/frsen.2022.869611
- Doerffer R, Schiller H (2007) The MERIS Case 2 water algorithm. *International Journal of Remote Sensing* 28:517–535. doi:10.1080/01431160600821127
- Dogliotti AI, Ruddick KG, Nechad B, Doxaran D, Knaeps E (2015) A single algorithm to retrieve turbidity from remotely-sensed data in all coastal and estuarine waters. *Remote Sensing of Environment* 156:157–168. doi:10.1016/j.rse.2014.09.020
- Dorji P, Fearn P (2017) Impact of the spatial resolution of satellite remote sensing sensors in the quantification of total suspended sediment concentration: A case study in turbid waters of Northern Western Australia. *PLoS ONE* 12:e0175042. doi:10.1371/journal.pone.0175042

- Duck R, Silva JF da (2012) Coastal lagoons and their evolution: A hydromorphological perspective. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 110:2–14. doi:10.1016/j.ecss.2012.03.007
- Fall KA, Friedrichs CT, Massey GM, Bowers DG, Smith SJ (2021) The Importance of Organic Content to Fractal Floc Properties in Estuarine Surface Waters: Insights From Video, LISST, and Pump Sampling. *JGR Oceans* 126:e2020JC016787. doi:10.1029/2020JC016787
- Fernandes E, Dyer KR, Moller OO, Niencheski LFH (2002) The Patos Lagoon hydrodynamics during an El Niño event (1998). *Continental Shelf Research* 22:1699–1713. doi:10.1016/S0278-4343(02)00033-X
- Fernandes E, Mariño-Tapia I, Dyer K, Möller O (2004) The attenuation of tidal and subtidal oscillations in the Patos Lagoon estuary. *Ocean Dynamics* 54:348–359. doi:10.1007/s10236-004-0090-y
- Gordon HR (1997) Atmospheric correction of ocean color imagery in the Earth Observing System era. *J. Geophys. Res.* 102:17081–17106. doi:10.1029/96JD02443
- Gordon HR, Brown OB, Evans RH, Brown JW, Smith RC, Baker KS, Clark DK (1988) A semianalytic radiance model of ocean color. *J. Geophys. Res.* 93:10909. doi:10.1029/JD093iD09p10909
- Gordon HR, Wang M (1994) Retrieval of water-leaving radiance and aerosol optical thickness over the oceans with SeaWiFS: a preliminary algorithm. *Appl. Opt.* 33:443–452. doi:10.1364/AO.33.000443
- Han B, Loisel H, Vantrepotte V, Mériaux X, Bryère P, Ouillon S, Dessailly D, Xing Q, Zhu J (2016) Development of a Semi-Analytical Algorithm for the Retrieval of Suspended Particulate Matter from Remote Sensing over Clear to Very Turbid Waters. *Remote Sensing* 8:211. doi:10.3390/rs8030211
- Haraguchi L, Carstensen J, Abreu PC, Odebrecht C (2015) Long-term changes of the phytoplankton community and biomass in the subtropical shallow Patos Lagoon Estuary, Brazil. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 162:76–87. doi:10.1016/j.ecss.2015.03.007
- Hartmann C, Harkot PFC (1990) Influência do Canal São Gonçalo no aporte de sedimentos para o estuário da Laguna dos Patos - RS. *Revista brasileira de geociências* 20:329–332. doi:10.25249/0375-7536.1990329332
- Hieronimi M, Bi S, Müller D, Schütt EM, Behr D, Brockmann C, Lebreton C, Steinmetz F, Stelzer K, Vanhellefont Q (2023) Ocean color atmospheric correction methods in view of usability for different optical water types. *Front. Mar. Sci.* 10:1129876. doi:10.3389/fmars.2023.1129876
- Hongve D, Åkesson G (1998) Comparison of nephelometric turbidity measurements using wavelengths 400–600 and 860 nm. *Water Research* 32:3143–3145. doi:10.1016/S0043-1354(98)00051-7

- IOCCG (2019) Uncertainties in Ocean Colour Remote Sensing. International Ocean Colour Coordinating Group, Dartmouth, Canada, pp. <https://www.oceanbestpractices.net/handle/11329/1178>
- Jung BM, Fernandes E, Möller OO, García-Rodríguez F (2020) Estimating Suspended Sediment Concentrations from River Discharge Data for Reconstructing Gaps of Information of Long-Term Variability Studies. *Water* 12:2382. doi:10.3390/w12092382
- Kitchener BG, Wainwright J, Parsons AJ (2017) A review of the principles of turbidity measurement. *Progress in Physical Geography: Earth and Environment* 41:620–642. doi:10.1177/0309133317726540
- Kjerfve B (1986) COMPARATIVE OCEANOGRAPHY OF COASTAL LAGOONS. *Estuarine Variability* Elsevier, pp 63–81. doi:10.1016/B978-0-12-761890-6.50009-5
- Kjerfve B (1994) Chapter 1 Coastal Lagoons. *Coastal Lagoon Processes* Elsevier, pp 1–8. doi:10.1016/S0422-9894(08)70006-0
- Lehmann MK, Gurlin D, Pahlevan N, Alikas K, Conroy T, Anstee J, Balasubramanian SV, Barbosa CCF, Binding C, Bracher A, Bresciani M, Burtner A, Cao Z, Dekker AG, Di Vittorio C, Drayson N, Errera RM, Fernandez V, Ficek D, Fichot CG, Gege P, Giardino C, Gitelson AA, Greb SR, Henderson H, Higa H, Rahaghi AI, Jamet C, Jiang D, Jordan T, Kangro K, Kravitz JA, Kristoffersen AS, Kudela R, Li L, Ligi M, Loisel H, Lohrenz S, Ma R, Maciel DA, Malthus TJ, Matsushita B, Matthews M, Minaudo C, Mishra DR, Mishra S, Moore T, Moses WJ, Nguyễn H, Novo EMLM, Novoa S, Odermatt D, O'Donnell DM, Olmanson LG, Ondrusek M, Oppelt N, Ouillon S, Pereira Filho W, Plattner S, Verdú AR, Salem SI, Schalles JF, Simis SGH, Siswanto E, Smith B, Somlai-Schweiger I, Soppa MA, Spyarakos E, Tessin E, Van Der Woerd HJ, Vander Woude A, Vandermeulen RA, Vantrepotte V, Wernand MR, Werther M, Young K, Yue L (2023) GLORIA - A globally representative hyperspectral in situ dataset for optical sensing of water quality. *Sci Data* 10:100. doi:10.1038/s41597-023-01973-y
- Loisel H, Morel A (2001) Non-isotropy of the upward radiance field in typical coastal (Case 2) waters. *International Journal of Remote Sensing* 22:275–295. doi:10.1080/014311601449934
- Luo Y, Doxaran D, Ruddick K, Shen F, Gentili B, Yan L, Huang H (2018) Saturation of water reflectance in extremely turbid media based on field measurements, satellite data and bio-optical modelling. *Opt. Express* 26:10435–10451. doi:10.1364/OE.26.010435
- Luo Y, Doxaran D, Vanhellemont Q (2020) Retrieval and Validation of Water Turbidity at Metre-Scale Using Pléiades Satellite Data: A Case Study in the Gironde Estuary. *Remote Sensing* 12:946. doi:10.3390/rs12060946
- Mabit R, Araújo CAS, Singh RK, Bélanger S (2022) Empirical Remote Sensing Algorithms to Retrieve SPM and CDOM in Québec Coastal Waters. *Front. Remote Sens.* 3:834908. doi:10.3389/frsen.2022.834908
- Maggi F (2013) The settling velocity of mineral, biomineral, and biological particles and aggregates in water. *JGR Oceans* 118:2118–2132. doi:10.1002/jgrc.20086

- Maritorena S, Siegel DA, Peterson AR (2002) Optimization of a semianalytical ocean color model for global-scale applications. *Appl. Opt.* 41:2705. doi:10.1364/AO.41.002705
- Marques WC, Fernandes E, Monteiro IO, Möller OO (2009) Numerical modeling of the Patos Lagoon coastal plume, Brazil. *Cont. Shelf. Res.* 29:556–571. doi:10.1016/j.csr.2008.09.022
- Marques WC, Fernandes EHL, Moraes BC, Möller OO, Malcherek A (2010) Dynamics of the Patos Lagoon coastal plume and its contribution to the deposition pattern of the southern Brazilian inner shelf. *J. Geophys. Res.* 115:2010JC006190. doi:10.1029/2010JC006190
- Mélin F, Vantrepotte V (2015) How optically diverse is the coastal ocean? *Remote Sensing of Environment* 160:235–251. doi:10.1016/j.rse.2015.01.023
- Merchant CJ, Embury O, Bulgin CE, Block T, Corlett GK, Fiedler E, Good SA, Mittaz J, Rayner NA, Berry D, Eastwood S, Taylor M, Tsushima Y, Waterfall A, Wilson R, Donlon C (2019) Satellite-based time-series of sea-surface temperature since 1981 for climate applications. *Sci Data* 6:223. doi:10.1038/s41597-019-0236-x
- Mobley CD, Werdell J, Franz B, Ahmad Z, Bailey S (2016) Atmospheric Correction for Satellite Ocean Color Radiometry. . <https://ntrs.nasa.gov/citations/20160011399>
- Moller O, Castaing P, Salomon J-C, Lazure P (2001) The Influence of Local and Non-Local Forcing Effects on the Subtidal Circulation of Patos Lagoon. *Estuaries* 24:297–311. doi:10.2307/1352953
- Moller O, Távora J, Moller B, Fernandes E (in preparation)
- 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 Sens. Environ.* 114:854–866. doi:10.1016/j.rse.2009.11.022
- Nechad B, Ruddick KG, Neukermans G (2009) Calibration and validation of a generic multisensor algorithm for mapping of turbidity in coastal waters. In: Bostater, Jr. CR, Mertikas SP, Neyt X, Velez-Reyes M (eds) *SPIE Europe Remote Sensing*. Berlin, Germany, pp 74730H. doi:10.1117/12.830700
- 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. *Limnol. Oceanogr. Methods* 10:1011–1023. doi:10.4319/lom.2012.10.1011
- Novoa S, Doxaran D, Ody A, Vanhellefont Q, Lafon V, Lubac B, Gernez P (2017) Atmospheric Corrections and Multi-Conditional Algorithm for Multi-Sensor Remote Sensing of Suspended Particulate Matter in Low-to-High Turbidity Levels Coastal Waters. *Remote Sensing* 9:61. doi:10.3390/rs9010061
- Ody A, Doxaran D, Verney R, Bourrin F, Morin GP, Pairaud I, Gangloff A (2022) Ocean Color Remote Sensing of Suspended Sediments along a Continuum from Rivers to

River Plumes: Concentration, Transport, Fluxes and Dynamics. *Remote Sens.* 14:2026. doi:10.3390/rs14092026

Oliveira H, Fernandes E, Möller O, Collares G (2015) Processos Hidrológicos e Hidrodinâmicos da Lagoa Mirim. *RBRH* 20:34–45. doi:10.21168/rbrh.v20n1.p34-45

Oliveira H, Fernandes E, Möller O, García-Rodríguez F (2019) Relationships between Wind Effect, Hydrodynamics and Water Level in the World's Largest Coastal Lagoonal System. *Water* 11:2209. doi:10.3390/w11112209

Pagot M, Rodríguez A, Hillman G, Corral M, Oroná C, Niencheski LF (2007) Remote Sensing Assessment of Suspended Matter and Dynamics in Patos Lagoon. *Journal of Coastal Research* 10047:116–129. doi:10.2112/1551-5036-47.sp1.116

Pahlevan N, Mangin A, Balasubramanian SV, Smith B, Alikas K, Arai K, Barbosa C, Bélanger S, Binding C, Bresciani M, Giardino C, Gurlin D, Fan Y, Harmel T, Hunter P, Ishikawa J, Kratzer S, Lehmann MK, Ligi M, Ma R, Martin-Lauzer F-R, Olmanson L, Oppelt N, Pan Y, Peters S, Reynaud N, Sander De Carvalho LA, Simis S, Spyrakos E, Steinmetz F, Stelzer K, Sterckx S, Tormos T, Tyler A, Vanhellefont Q, 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. doi:10.1016/j.rse.2021.112366

Pahlevan N, Sarkar S, Franz BA (2016) Uncertainties in coastal ocean color products: Impacts of spatial sampling. *Remote Sensing of Environment* 181:14–26. doi:10.1016/j.rse.2016.03.022

Park Y-J, Ruddick K (2005) Model of remote-sensing reflectance including bidirectional effects for case 1 and case 2 waters. *Appl. Opt.* 44:1236. doi:10.1364/AO.44.001236

Paulino RS, Martins VS, Novo EMLM, Barbosa CCF, De Carvalho LAS, Begliomini FN (2022) Assessment of Adjacency Correction over Inland Waters Using Sentinel-2 MSI Images. *Remote Sensing* 14:1829. doi:10.3390/rs14081829

Pope RM, Fry ES (1997) Absorption spectrum (380–700 nm) of pure water II Integrating cavity measurements. *Appl. Opt.* 36:8710. doi:10.1364/AO.36.008710

Pritchard DW (1967) What is an estuary: physical viewpoint. In: American Association for the Advancement of Science, pp

Renosh PR, Doxaran D, Keukelaere LD, Gossn JI (2020) Evaluation of Atmospheric Correction Algorithms for Sentinel-2-MSI and Sentinel-3-OLCI in Highly Turbid Estuarine Waters. *Remote Sens.* 12:1285. doi:10.3390/rs12081285

Reynolds RA, Stramski D, Neukermans G (2016) Optical backscattering by particles in Arctic seawater and relationships to particle mass concentration, size distribution, and bulk composition. *Limnology & Oceanography* 61:1869–1890. doi:10.1002/lno.10341

Rouse H (1937) Modern Conceptions of the Mechanics of Fluid Turbulence. *T. Am. Soc. Civ. Eng.* 102:463–505. doi:10.1061/TACEAT.0004872

Ruddick KG, De Cauwer V, Park Y-J, Moore G (2006) Seaborne measurements of near infrared water-leaving reflectance: The similarity spectrum for turbid waters. *Limnol. Oceanogr.* 51:1167–1179. doi:10.4319/lo.2006.51.2.1167

Salama MhdS, Monbaliu J, Coppin P (2004) Atmospheric correction of Advanced Very High Resolution Radiometer imagery. *International Journal of Remote Sensing* 25:1349–1355. doi:10.1080/01431160310001592283

Salama MhdS, Radwan M, Van Der Velde R (2012) A hydro-optical model for deriving water quality variables from satellite images (HydroSat): A case study of the Nile River demonstrating the future Sentinel-2 capabilities. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C* 50–52:224–232. doi:10.1016/j.pce.2012.08.013

Salama MhdS, Verhoef W (2015) Two-stream remote sensing model for water quality mapping: 2SeaColor. *Remote Sensing of Environment* 157:111–122. doi:10.1016/j.rse.2014.07.022

Salama MS, Van Der Velde R, Van Der Woerd HJ, Kromkamp JC, Philippart CJM, Joseph AT, O'Neill PE, Lang RH, Gish T, Werdell PJ, Su Z (2012) Technical Note: Calibration and validation of geophysical observation models. *Biogeosciences* 9:2195–2201. doi:10.5194/bg-9-2195-2012

Sathyendranath S, Brewin R, Brockmann C, Brotas V, Calton B, Chuprin A, Cipollini P, Couto A, Dingle J, Doerffer R, Donlon C, Dowell M, Farman A, Grant M, Groom S, Horseman A, Jackson T, Krasemann H, Lavender S, Martinez-Vicente V, Mazeran C, Mélin F, Moore T, Müller D, Regner P, Roy S, Steele C, Steinmetz F, Swinton J, Taberner M, Thompson A, Valente A, Zühlke M, Brando V, Feng H, Feldman G, Franz B, Frouin R, Gould R, Hooker S, Kahru M, Kratzer S, Mitchell B, Muller-Karger F, Sosik H, Voss K, Werdell J, Platt T (2019) An Ocean-Colour Time Series for Use in Climate Studies: The Experience of the Ocean-Colour Climate Change Initiative (OC-CCI). *Sensors* 19:4285. doi:10.3390/s19194285

Seegers BN, Stumpf RP, Schaeffer BA, Loftin KA, Werdell PJ (2018) Performance metrics for the assessment of satellite data products: an ocean color case study. *Opt. Express* 26:7404. doi:10.1364/OE.26.007404

Shen F, Verhoef W, Zhou Y, Salama MhdS, Liu X (2010) Satellite Estimates of Wide-Range Suspended Sediment Concentrations in Changjiang (Yangtze) Estuary Using MERIS Data. *Estuaries and Coasts* 33:1420–1429. doi:10.1007/s12237-010-9313-2

Steinmetz F, Deschamps P-Y, Ramon D (2011) Atmospheric correction in presence of sun glint: application to MERIS. *Opt. Express* 19:9783–9800. doi:10.1364/OE.19.009783

Steinmetz F, Ramon D (2018) Sentinel-2 MSI and Sentinel-3 OLCI consistent ocean colour products using POLYMER. In: Frouin RJ, Murakami H (eds) *Proceedings of Remote Sensing of the Open and Coastal Ocean and Inland Waters*. SPIE, Honolulu, United States, pp 10. doi:10.1117/12.2500232

Strickland JD, Parsons TR (1972) *A practical handbook of seawater analysis*. Fisheries Research Board of Canada, Ottawa, pp

- Tanre D, Herman M, Deschamps PY (1981) Influence of the background contribution upon space measurements of ground reflectance. *Appl. Opt.* 20:3676. doi:10.1364/AO.20.003676
- Távora 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. *Remote Sensing* 12:2172. doi:10.3390/rs12132172
- Távora J, Fernandes E, Bitencourt L, Orozco P (2020) El-Niño Southern Oscillation (ENSO) effects on the variability of Patos Lagoon Suspended Particulate Matter. *Regional Studies in Marine Science* 40:101495. doi:10.1016/j.rsma.2020.101495
- Távora J, Fernandes E, Möller OO (2021) Patos Lagoon, Brazil, Suspended Particulate Matter (SPM) data compendium. *Geosci. Data J.* 00:1–21. doi:10.1002/gdj3.134
- Távora J, Fernandes E, Thomas A, Weatherbee R, Schettini C (2019) The influence of river discharge and wind on Patos Lagoon, Brazil, Suspended Particulate Matter. *International Journal of Remote Sensing* 40:4506–4525. doi:10.1080/01431161.2019.1569279
- Távora J, Gonçalves GA, Fernandes EH, Salama MhdS, Van Der Wal D (2023) Detecting turbid plumes from satellite remote sensing: State-of-art thresholds and the novel PLUMES algorithm. *Front. Mar. Sci.* 10:1215327. doi:10.3389/fmars.2023.1215327
- Távora J, Jiang B, Kiffney T, Bourdin G, Gray PC, Carvalho LS, Hesketh G, Schild KM, Souza LF, Brady DC, Boss E (2023) Recipes for the Derivation of Water Quality Parameters Using the High-Spatial-Resolution Data from Sensors on Board Sentinel-2A, Sentinel-2B, Landsat-5, Landsat-7, Landsat-8, and Landsat-9 Satellites. *J Remote Sens* 3:0049. doi:10.34133/remotesensing.0049
- Theenathayalan V, Sathyendranath S, Kulk G, Menon N, George G, Abdulaziz A, Selmes N, Brewin R, Rajendran A, Xavier S, Platt T (2022) Regional Satellite Algorithms to Estimate Chlorophyll-a and Total Suspended Matter Concentrations in Vembanad Lake. *Remote Sensing* 14:6404. doi:10.3390/rs14246404
- Tran MD, Vantrepotte V, Loisel H, Oliveira EN, Tran KT, Jorge D, Mériaux X, Paranhos R (2023) Band Ratios Combination for Estimating Chlorophyll-a from Sentinel-2 and Sentinel-3 in Coastal Waters. *Remote Sensing* 15:1653. doi:10.3390/rs15061653
- Turner A, Millward GE (2002) Suspended Particles: Their Role in Estuarine Biogeochemical Cycles. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 55:857–883. doi:10.1006/ecss.2002.1033
- Valente A, Sathyendranath S, Brotas V, Groom S, Grant M, Taberner M, Antoine D, Arnone R, Balch WM, Barker K, Barlow R, Bélanger S, Berthon J-F, Beşiktepe Ş, Brando V, Canuti E, Chavez F, Claustre H, Crout R, Frouin R, García-Soto C, Gibb SW, Gould R, Hooker S, Kahru M, Klein H, Kratzer S, Loisel H, McKee D, Mitchell BG, Moisan T, Muller-Karger F, O'Dowd L, Ondrusek M, Poulton AJ, Repecaud M, Smyth T, Sosik HM, Twardowski M, Voss K, Werdell J, Wernand M, Zibordi G (2016) A

compilation of global bio-optical in situ data for ocean-colour satellite applications. *Earth Syst. Sci. Data* 8:235–252. doi:10.5194/essd-8-235-2016

Vandermeulen RA, Mannino A, Craig SE, Werdell PJ (2020) 150 shades of green: Using the full spectrum of remote sensing reflectance to elucidate color shifts in the ocean. *Remote Sensing of Environment* 247:111900. doi:10.1016/j.rse.2020.111900

Vanhellemont Q, Ruddick K (2014) Turbid wakes associated with offshore wind turbines observed with Landsat 8. *Remote Sens. Environ.* 145:105–115. doi:10.1016/j.rse.2014.01.009

Vanhellemont Q, Ruddick K (2018) Atmospheric correction of metre-scale optical satellite data for inland and coastal water applications. *Remote Sens. Environ.* 216:586–597. doi:10.1016/j.rse.2018.07.015

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 Sens. Environ.* 256:112284. doi:10.1016/j.rse.2021.112284

Vantrepotte V, Gensac E, Loisel H, Gardel A, Dessailly D, Mériaux X (2013) Satellite assessment of the coupling between in water suspended particulate matter and mud banks dynamics over the French Guiana coastal domain. *Journal of South American Earth Sciences* 44:25–34. doi:10.1016/j.jsames.2012.11.008

Vaz A, Möller O, Almeida T (2006) Análise quantitativa da descarga dos rios afluentes da Lagoa dos Patos. *Atlântica* 28:13–23. doi:10.5088/atlantica.v28i1.1724

Vermote EF, Tanre D, Deuze JL, Herman M, Morcette J-J (1997) Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum, 6S: an overview. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing* 35:675–686. doi:10.1109/36.581987

Wang M (1999) Atmospheric correction of ocean color sensors: computing atmospheric diffuse transmittance. *Appl. Opt.* 38:451. doi:10.1364/AO.38.000451

Wang M, Shi W (2007) The NIR-SWIR combined atmospheric correction approach for MODIS ocean color data processing. *Opt. Express* 15:15722. doi:10.1364/OE.15.015722

Willmott C, Robeson S, Matsuura K (2017) Climate and Other Models May Be More Accurate Than Reported. *EOS [Preprint]*. doi:10.1029/2017EO074939

Winterwerp JC, Wang ZB (2013) Man-induced regime shifts in small estuaries—I: theory. *Ocean Dynamics* 63:1279–1292. doi:10.1007/s10236-013-0662-9

Zavialov PO, Pelevin VV, Belyaev NA, Izhitskiy AS, Konovalov BV, Kremenskiy VV, Goncharenko IV, Osadchiov AA, Soloviev DM, Garcia CAE, Pereira ES, Sartorato L, Moller OO (2018) High resolution LiDAR measurements reveal fine internal structure and variability of sediment-carrying coastal plume. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 205:40–45. doi:10.1016/j.ecss.2018.01.008

Zibordi G, Mélin F, Berthon J-F, Holben B, Slutsker I, Giles D, D'Alimonte D, Vandemark D, Feng H, Schuster G, Fabbri BE, Kaitala S, Seppälä J (2009) AERONET-OC: A Network for the Validation of Ocean Color Primary Products. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology* 26:1634–1651. doi:10.1175/2009JTECHO654.1